



Observations millimétriques de molécules circumstellaires : de la recherche de nouvelles espèces, à la mesure d'abondances isotopiques

Claudine Kahane

► To cite this version:

Claudine Kahane. Observations millimétriques de molécules circumstellaires : de la recherche de nouvelles espèces, à la mesure d'abondances isotopiques. Astrophysique stellaire et solaire [astro-ph.SR]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 1989. Français. NNT : . tel-00724537

HAL Id: tel-00724537

<https://theses.hal.science/tel-00724537>

Submitted on 21 Aug 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE
présentée à
L'UNIVERSITE JOSEPH FOURIER
par

Claudine KAHANE

Pour obtenir le titre de
Docteur d'Etat es Sciences

**OBSERVATIONS MILLIMETRIQUES DE
MOLECULES CIRCUMSTELLAIRES :
DE LA RECHERCHE DE NOUVELLES ESPECES,
A LA MESURE D'ABONDANCES ISOTOPIQUES.**

soutenue le 8 Septembre 1989
devant le Jury d'Examen constitué de :

<i>Messieurs</i>	<i>Alain</i>	OMONT	<i>Président</i>
	<i>Michel</i>	GUELIN	
	<i>Mike</i>	JURA	
	<i>Maurice</i>	LOMBARDI	
	<i>Robert</i>	LUCAS	
<i>Madame</i>	<i>Sylvie</i>	VAUCLAIR	

*Thèse préparée au sein du Groupe d'Astrophysique de l'Observatoire de
Grenoble (U.A. n° 708 du C.N.R.S.)*

THESE
présentée à
L'UNIVERSITE JOSEPH FOURIER
par

Claudine KAHANE

Pour obtenir le titre de
Docteur d'Etat es Sciences

**OBSERVATIONS MILLIMETRIQUES DE
MOLECULES CIRCUMSTELLAIRES :
DE LA RECHERCHE DE NOUVELLES ESPECES,
A LA MESURE D'ABONDANCES ISOTOPIQUES.**

soutenue le 8 Septembre 1989
devant le Jury d'Examen constitué de :

<i>Messieurs</i>	Alain	OMONT	<i>Président</i>
	Michel	GUELIN	
	Mike	JURA	
	Maurice	LOMBARDI	
	Robert	LUCAS	
<i>Madame</i>	Sylvie	VAUCLAIR	

*Thèse préparée au sein du Groupe d'Astrophysique de l'Observatoire de
Grenoble (U.A. n° 708 du C.N.R.S.)*

Parmi les trois sens propres à nous faire apercevoir l'existence des corps éloignés, celui de la vue est évidemment le seul qui puisse être employé relativement aux corps célestes (...) Toute recherche qui n'est point finalement réductible à de simples observations visuelles nous est donc interdite au sujet des astres, qui sont ainsi de tous les êtres naturels ceux que nous pouvons connaître sous les rapports les moins variés. Nous concevons la possibilité de déterminer leurs formes, leurs distances, leurs grandeurs et leurs mouvements; tandis que nous ne saurions jamais étudier par aucun moyen leur composition chimique, ni leur structure minéralogique, et, à plus forte raison, la nature des corps inorganisés qui vivent à leur surface, etc. En un mot, pour employer immédiatement les expressions scientifiques les plus précises, nos connaissances positives par rapport aux astres sont nécessairement limitées aux seuls phénomènes géométriques et mécaniques, sans pouvoir nullement embrasser les autres recherches physiques, chimiques, physiologiques, et même sociales, que comportent les êtres accessibles à tous nos divers moyens d'observation.

Il est indispensable (...) de poser (...) des limites générales [à nos connaissances], pour que l'esprit humain ne se laisse point égarer dans le vague des recherches nécessairement inabordables (...)

(Auguste Comte, Cours de Philosophie Positive, 19ème leçon, II, 1-3)

Remerciements

Nombreux sont celles et ceux qui ont, d'une façon ou d'une autre, contribué au travail présenté dans ce mémoire. Qu'ils trouvent ici l'expression de mes remerciements les plus sincères.

Monsieur Alain Omont m'a accueillie en 1980 dans le Groupe d'Astrophysique. Tout au long de ces années, il a manifesté une attention constante, tant pour mon travail de recherche, que pour l'évolution de ma situation professionnelle. Je tiens à l'en remercier vivement. Malgré ses nombreuses activités, je l'ai toujours connu disponible pour toute discussion scientifique, et ses conseils et encouragements m'ont été fort précieux. Je lui suis également très reconnaissante d'avoir été en grande partie à l'origine de mon intérêt pour les enveloppes circumstellaires. Enfin, je voudrais le remercier d'avoir accepté de présider ce jury.

Monsieur Robert Lucas m'a initiée à la radioastronomie et, après avoir encadré les travaux qui ont donné lieu à ma Thèse de Troisième Cycle, il a accepté la direction de ma Thèse d'Etat. Je l'en remercie sincèrement.

Dans le cadre de l'active collaboration qui s'est établie entre le Groupe d'Astrophysique de l'Université de Grenoble et le Département d'Astronomie de l'Université de Californie à Los Angeles (UCLA), j'ai souvent eu, depuis deux ans, l'occasion de bénéficier de discussions, écrites ou orales, extrêmement enrichissantes, avec Monsieur le Professeur Mike Jura, sur les enveloppes circumstellaires. Je voudrais aussi le remercier de m'avoir permis d'effectuer, en novembre 1987, un séjour très fructueux dans son laboratoire. Je tiens également à lui exprimer ma gratitude pour avoir accepté de faire partie de ce jury.

Messieurs Michel Guélin et Jose Cernicharo m'ont fait partager leur passion pour la recherche de nouvelles molécules, et le travail présenté ici doit beaucoup, tant à leur enthousiasme, en particulier lors de nos séjours au télescope, qu'à l'aide qu'ils m'ont apportée dans le domaine de la spectroscopie moléculaire. Qu'ils en soient chaleureusement remerciés.

Je remercie sincèrement Madame Sylvie Vauclair et Monsieur Maurice Lombardi, de l'intérêt qu'ils ont manifesté pour mon travail, en acceptant de participer à ce jury.

Les observations rassemblées dans ce mémoire sont aussi le fruit de la gentillesse, de la compétence et de la disponibilité des ingénieurs et des opérateurs du radiotélescope de l'IRAM, au Pico Veleta, en Espagne. Qu'ils trouvent ici l'expression de ma sincère reconnaissance.

Par leurs conseils, leurs encouragements, leur amitié, tous les membres du Groupe d'Astrophysique m'ont aidée à mener à bien ce travail. Ils trouveront ici l'expression de mes remerciements chaleureux.

Je ne saurais terminer sans souligner que l'affection, la confiance et le soutien de mes proches m'ont toujours été une aide irremplaçable. Je tiens à leur exprimer ici ma plus profonde gratitude.

Table des Matières

Introduction	11
Première partie : Recherche de nouvelles molécules	17
Chapitre 1 : Le catalogue de raies moléculaires	19
I. Présentation	19
II. Expression du Hamiltonien	21
A. Le Hamiltonien rotationnel non perturbé	21
1. Molécules linéaires	21
2. Molécules symétriques	23
3. Molécules asymétriques	24
B. La distorsion centrifuge	27
1. Molécules linéaires	28
2. Molécules symétriques	29
3. Molécules asymétriques	31
C. Structure fine	32
1. Les molécules $^2\Sigma$	33
2. Les molécules $^3\Sigma$	36
3. Les molécules $^2\Pi$	37
D. Structure hyperfine	40
1. Couplage quadrupolaire par un noyau unique	41
2. Couplage quadrupolaire par deux noyaux	44
3. Structure hyperfine magnétique	45
E. Tableau récapitulatif	48
III. Quelques méthodes de détermination des constantes	49
A. Calcul direct des moments d'inertie	50
B. Substitution isotopique	51

Chapitre 2 : Recherche et détection de nouvelles molécules 55

I. Pourquoi chercher de nouvelles molécules ?	55
II. Où chercher de nouvelles molécules ?	57
III. Les couvertures spectrales d'Orion et d'IRC+10216	60
A. Observations d' IRC+10216	60
1. Présentation de la couverture spectrale	60
2. Dépouillement et calibration des spectres	63
3. Température de rotation et densité projetée des molécules	65
B. Observations d' OrionA	86
IV. Détection et identification de nouvelles molécules	89
A. Détection des isotopes ^{13}C de C_3H_2 et de CH_3NC	89
1. Les isotopes de C_3H_2	89
2. La détection de CH_3NC	93
B. Détection des isotopes $^{29}\text{SiCC}$ et $^{30}\text{SiCC}$	97
C. Détection de la chaîne carbonée C_5H	103
D. Identification de la chaîne carbonée C_6H	115
E. Découverte d'un nouveau radical libre	121
F. L'abondance du soufre dans IRC+10216	127

Deuxième Partie : Rapports isotopiques dans les enveloppes circumstellaires 133

Chapitre 3 : Quelques généralités sur les enveloppes circumstellaires 135

I. Les géantes rouges	135
A. Quelques rappels sur l'évolution stellaire	136
B. Les trois principaux types de Géantes Rouges	138
C. Nucléosynthèse et mélange des produits "processés"	139
II. Les enveloppes circumstellaires autour des géantes rouges	142
A. Le phénomène de perte de masse	142
1. Détermination des taux de perte de masse et des vitesses d'expansion	142
2. Mécanismes d'accélération des vents	148
B. Structure des enveloppes circumstellaires	150
1. IRC+10216	150

2. Les autres enveloppes	155
C. Transfert radiatif dans les enveloppes - Formes de raies	155
1. Transfert radiatif	156
2. Formes de raies	156
Chapitre 4 : Mesure de rapports isotopiques dans les enveloppes circumstellaires	161
I. Méthode de détermination des rapports isotopiques	161
II. Carbone, azote, soufre et silicium dans l'enveloppe IRC+10216	165
III. Le rapport $^{12}\text{C} / ^{13}\text{C}$ dans quatre étoiles de type J	181
A. Observations ^{12}CO et ^{13}CO ($J=1-0$)	181
B. Autres observations d' isotopes ^{12}C et ^{13}C	195
1. Les observations	195
2. Les résultats	197
IV. mesure des rapports isotopiques de l'oxygene dans cinq enveloppes	207
A. Position du problème	207
B. Les observations	209
C. Réduction des données	216
1. Analyse des spectres	216
2. Détermination des rapports isotopiques	221
D. Comparaison avec les rapports isotopiques mesurés en IR	227
1. Le rapport $^{17}\text{O}/^{18}\text{O}$	227
2. Les rapports $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$ et $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$	228
Conclusions et Perspectives	233
Annexe A : Raies identifiées dans IRC+10216	239
Annexe B : Observations de l'enveloppe circumstellaire V Hya	253
Références Bibliographiques	265

Introduction

La radioastronomie millimétrique n'a pas vingt ans : ce n'est qu'au printemps 1970, que le premier récepteur millimétrique fut mis en service, au foyer du télescope de 11m de Kitt Peak (Arizona) et cette ouverture de la radioastronomie vers les courtes longueurs d'ondes provoqua immédiatement une véritable explosion du nombre de nouvelles molécules interstellaires détectées.

L'histoire de l'observation des molécules interstellaires avait commencé dans les années quarante avec la découverte des premiers radicaux libres (CH, par Swings et Rosenberg en 1937, CN et CH⁺, par Adams en 1940 et 1941), grâce à leurs raies optiques en absorption dans le spectre d'étoiles brillantes. C'est en 1962, que furent observées pour la première fois, par Barrett et Weinreb, les quatre raies à 18 cm du quatrième radical interstellaire, OH, en absorption devant l'émission continuum de plusieurs radio sources très intenses. A la fin des années soixante, la construction de récepteurs radio permettant d'atteindre des longueurs d'onde de l'ordre du centimètre fut à l'origine d'un important bouleversement des idées sur la composition du milieu interstellaire : en quelques mois, les détections de l'ammoniac NH₃ et de l'eau H₂O (par le père du laser, Townes, et ses collaborateurs), puis du formaldéhyde, H₂CO, par Buhl, Snyder, Zuckerman et Palmer, mirent en évidence que la chimie interstellaire pouvait produire en abondance des molécules bien plus complexes que ce que les premières découvertes laissaient supposer.

La mise en service, en 1970, du premier récepteur radio fonctionnant à 3 mm donna lieu à un essor spectaculaire de la recherche de nouvelles espèces interstellaires : dès la première année d'utilisation de ce récepteur, cinq nouvelles molécules furent détectées, dont le monoxyde de carbone, CO, la molécule interstellaire la plus abondante après l'hydrogène, H₂, qui n'est pas détectable en ondes radio. Le mois d'avril 1971 détient très probablement le record du taux de découvertes, puisque six nouvelles molécules furent détectées en 10 jours ! L'identification des raies ne fut pas toujours chose facile : il fallut six années d'efforts pour que le mystérieux X-ogène, détecté en 1970 par Buhl et Snyder, fût définitivement identifié à l'ion HCO⁺, grâce à la découverte et à l'identification, en 1976, de la raie J=1-0 de l'isotope H¹³CO⁺, par Snyder, Hollis, Lovas et Ulich.

Les années soixante dix constituent l'âge d'or des chercheurs de nouvelles molécules interstellaires. En ne comptabilisant que les isotopes principaux, 42 espèces furent

découvertes de 1970 à 1979, grâce à des observations réalisées pour la plupart avec le télescope de 11m de Kitt Peak, mais également pour certaines, avec l'antenne de 100m d'Effelsberg (en ondes centimétriques), et les antennes de 7m des Bell Telephone Laboratories, dans le New Jersey, et de 20m de l'Observatoire d'Onsala, en Suède, fonctionnant toutes deux en ondes millimétriques (voir la Figure I.1).

Après une diminution sensible du nombre de découvertes au début des années 80, l'apparition d'une nouvelle génération de récepteurs millimétriques, de type SIS, beaucoup moins bruyants que les récepteurs de type Schottky, la multiplication des observations à 2mm puis 1mm, puis la mise en service de deux nouveaux grands radiotélescopes, le 45m japonais de Nobeyama aux longueurs d'ondes inférieures ou égales à 3mm et surtout, le 30m franco-allemand-espagnol de l'IRAM, au Pico Veleta, sur la Sierra Nevada, qui permet d'observer jusqu'à 1mm, ont marqué la naissance d'une nouvelle vague de découvertes (voir la Figure I.1).

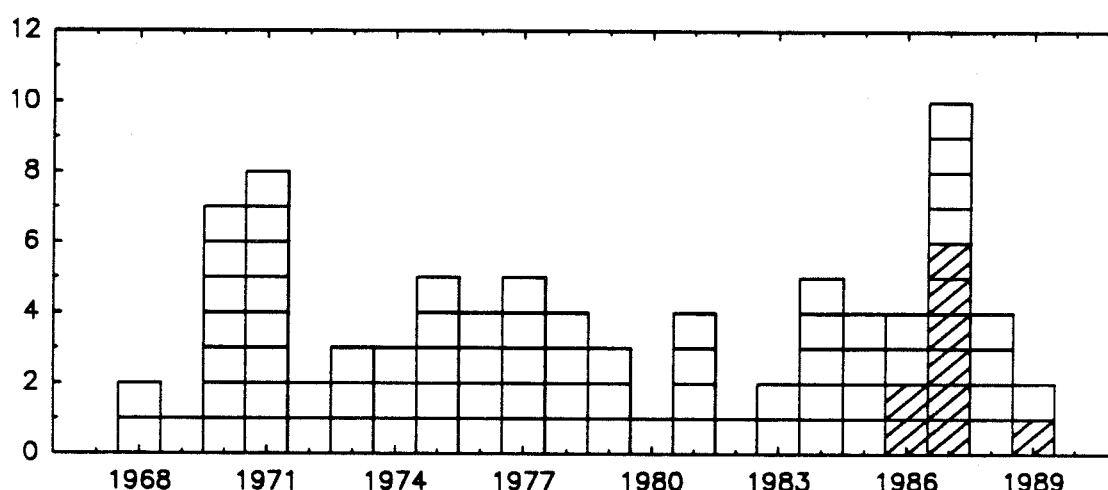


Figure I.1 : Nombre de molécules interstellaires et circumstellaires (isotopes non compris) découvertes chaque année, en émission radio, depuis 1968. Chaque case représente une molécule. Les cases hachurées correspondent aux détections de nouvelles molécules réalisées avec le radiotélescope de 30m de l'IRAM au Pico Veleta.

Le nombre total de molécules détectées à ce jour en émission radio dans l'espace interstellaire se monte à 88 (environ 150 en comptant les substitués isotopiques). Nous en avons rassemblé la liste dans la Table I.1.

La recherche, la détection avec le radiotélescope de 30m de l'IRAM et l'identification de 8 molécules, jusqu'alors inconnues dans l'espace interstellaire, et pour, certaines jamais

observées non plus au laboratoire, feront l'objet de la première partie du travail exposé ici. C'est dans l'enveloppe circumstellaire IRC+10216 que ces nouvelles espèces (sauf deux) ont d'abord été détectées.

En effet, dès les débuts de la radioastronomie millimétrique, cette enveloppe d'étoile géante rouge carbonée s'est révélée une source moléculaire extrêmement riche : la raie ($J=1-0$) de CO y a été détectée en 1970 par Solomon, Jefferts, Penzias et Wilson, cette découverte a été suivie par celles de CS et HCN en 1971 (Wilson *et al*, Morris *et al*), puis les détectations de nouvelles raies dans cette enveloppe se sont rapidement multipliées. La couverture spectrale à 2mm et à 3mm que nous avons réalisée avec le 30m de l'IRAM, et que nous présentons dans la deuxième partie de notre exposé, a permis de détecter plus de 300 raies appartenant à quelques 40 molécules identifiées (ou à leurs substitués isotopiques) et environ 80 raies encore non identifiées.

L'observation dans le domaine radio des raies moléculaires en provenance d'autres enveloppes circumstellaires s'est développée plus tardivement. Les premières détectations ont été celles de l'émission maser des raies à 18cm du radical OH, dans les enveloppes de géantes rouges oxygénées. Elles ont été réalisées par Wilson et Barrett en 1970 et ont conduit à la définition d'une nouvelle classe de géantes rouges : les étoiles "OH/IR", ainsi nommées en raison de l'association des raies maser de OH et d'une forte émission infrarouge en provenance de ces enveloppes.

En 1973, quelques enveloppes carbonées autres que IRC+10216, furent détectées dans les émissions ($J=1-0$) de CO, HCN et leurs isotopes ^{13}C (Wilson *et al*, 1973), puis, en 1974, l'émission maser de SiO fut observée dans des enveloppes oxygénées (Buhl *et al*, 1974), mais les véritables débuts de l'observation millimétrique des enveloppes circumstellaires datent de la fin des années 70. Le nombre d'enveloppes détectées en ondes millimétriques (principalement dans les émissions (1-0) et (2-1) de CO) s'est considérablement accru à partir de 1985, grâce aux nouveaux outils d'observation (récepteurs et télescopes) qui devinrent accessibles à cette date. L'apport du radiotélescope de l'IRAM, dans ce domaine également, a d'ores et déjà été considérable. Citons en particulier, la détection d'enveloppes très froides (Likkell *et al*, 1987,1988; Heske *et al*, 1989), de nombreuses observations d'enveloppes circumstellaires en émissions CO, HCN et SiO (Nguyen-Q-Rieu *et al*, 1987; Bujarrabal *et al*, 1989;), la découverte d'un nouveau maser circumstellaire, HCN (Guilloteau *et al*, 1987; Lucas *et al*, 1988; Lucas et Cernicharo, 1989), l'observation de molécules sulfurées dans les enveloppes oxygénées (Lucas *et al*, 1986; Morris *et al*, 1987;

Omont *et al*, 1989), des cartographies d'émission CO de nébuleuses planétaires et pre-planétaires (Bachiller *et al*, 1987, 1988; Bujarrabal *et al*, 1989). Bénéficiant à la fois du gain en résolution spatiale qu'apporte la taille de l'antenne et de la grande qualité des récepteurs installés au foyer de ce télescope, nous avons pu observer de nombreuses raies de substitués isotopiques rares, dans des enveloppes circumstellaires. Ces observations et la détermination des rapports d'abondance isotopiques qu'elles permettent constitueront l'objet principal de la deuxième partie du travail présenté ici.

Table I.1 : Liste des molécules interstellaires et circumstellaires (juin 1989)
et date de leur première détection

Molécule	Date	Molécule	Date	Molécule	Date
H ₂	1970	C ₂	1980	OH	1963
H ₂ D ⁺ ?	1985	C ₃	1988	H ₂ O	1968
		C ₅	1989	H ₃ O ⁺ ?	1986
CH	1937				
CH ⁺	1941	CO	1970	N ₂ H ⁺	1977
C ₂ H	1974	CO ⁺	1981	NH ₃	1968
C ₃ H (linéaire)	1985	C ₃ O	1984		
C ₄ H	1978			H ₂ S	1972
C ₅ H	1986	CN	1940		
C ₆ H	1987	C ₃ N	1977	NO	1978
CH ₄	1978			NS	1975
C ₂ H ₂	1976	CS	1973	NP	1987
C ₂ H ₄	1981	C ₂ S	1987		
CH ₃ C ₂ H	1971	C ₃ S	1987	SO	1973
CH ₃ C ₄ H	1984			SO ₂	1976
C ₃ H ₂	1985	HCN	1970		
C ₃ H (cycle)	1987	HCNH ⁺	1986	SiO	1971
		HNC	1971	SiS	1981
HCO	1976	HC ₃ N	1970	SiC	1989
HCO ⁺	1970	HC ₅ N	1976	SiCC	1984
HOC ⁺ ?	1983	HC ₇ N	1978	HSiCC ?	1986
HOCO ⁺	1981	HC ₉ N	1979	SiH ₄	1984
H ₂ CO	1969	HC ₁₁ N ?	1982		
CH ₃ OH	1970	CH ₂ NH	1972	HCS ⁺	1983
HCOOH	1970	CH ₂ CN	1988	H ₂ CS	1971
H ₂ CCO	1977	NH ₂ CN	1975	CH ₃ SH	1979
CH ₃ CHO	1973	CH ₃ CN	1971		
CH ₃ CH ₂ OH	1975	CH ₃ NC	1988	OCS	1971
HCCCHO	1988	CH ₃ NH ₂	1974		
CH ₃ OCH ₃	1974	CH ₂ CHCN	1975	AlCl	1987
CH ₃ COCH ₃ ?	1987	CH ₃ CH ₂ CN	1977	KCl	1987
HCOOCH ₃	1975	CH ₃ C ₃ N	1984	NaCl	1987
				HCl ?	1985
HNCO	1971			AlF	1987
HNCS	1979				
HNO	1977				
NH ₂ CHO	1971				

La détection des molécules marquées d'un ? demande confirmation. L'identification de HSiCC n'est pas certaine (voir le chapitre 2).

PREMIERE PARTIE

RECHERCHE DE NOUVELLES MOLECULES

Au début des années 1980, la recherche de nouvelles molécules interstellaires, qui avait connu un formidable essor lors des dix années précédentes, s'essouffait assez rapidement et l'idée selon laquelle la plupart des molécules intéressantes avaient déjà été découvertes et que l'on ne trouverait plus que les isotopes rares de ces espèces commençait à se répandre largement. C'est alors que le développement d'une nouvelle génération de récepteurs, de type SIS, et la mise en service de deux très grands radiotélescopes, le 45m de Nobeyama au Japon, et le 30m de l'IRAM, en Espagne, a relancé la course aux nouvelles molécules. Grâce au gain de sensibilité apporté par ces antennes de grande taille et par l'utilisation de récepteurs de plus en plus performants mais aussi en raison de l'exploration de bandes de fréquences nouvelles, en moins de trois ans des découvertes aussi importantes que celle des deux premières molécules cycliques interstellaires, SiC_2 (Thaddeus *et al*, 1984) et C_3H_2 (Thaddeus *et al*, 1985b), ou celles de composés métalliques dans une enveloppe circumstellaire (Cernicharo et Guélin, 1987) ont pu être effectuées.

La grande majorité des molécules interstellaires se manifeste dans le domaine des ondes millimétriques sous la forme de raies de rotation. Dans de très nombreux cas, ces transitions ne sont pas observables au laboratoire (beaucoup de molécules interstellaires sont extrêmement réactives et ont une durée de vie très courte dans les conditions terrestres). De plus, les études spectroscopiques de laboratoire ne sont pas toujours effectuées aux fréquences des transitions d'intérêt astrophysique. Dans un cas comme dans l'autre, il est nécessaire de déterminer par le calcul les fréquences des transitions intéressantes pour la recherche interstellaire.

Dans le chapitre prochain, nous présentons brièvement le programme que nous avons développé pour calculer les fréquences des transitions moléculaires d'intérêt astrophysique et nous explicitons les différents termes qui interviennent dans le hamiltonien qui permet de calculer les niveaux d'énergie. L'ensemble des constantes moléculaires prises en compte par

le programme est répertorié à la fin du chapitre, où figure également un rapide descriptif de quelques méthodes de détermination des constantes de rotation.

Le chapitre suivant est consacré à l'exposé de la découverte elle-même de nouvelles molécules dans le milieu interstellaire et circumstellaire, grâce à des observations que nous avons effectuées avec l'antenne de 30m de l'IRAM, au Pico Veleta, en Espagne.

Chapitre 1

Le catalogue de raies moléculaires

I. PRESENTATION

A partir d'un programme initialement élaboré par M. Guélin, J. Cernicharo et moi-même avons développé un catalogue de raies moléculaires d'intérêt astrophysique. La version originale du programme ne permettait que le calcul des fréquences de transition inférieures à 150 GHz; en prévision du développement d'une nouvelle génération de récepteurs à haute fréquence, nous avons complété ce programme afin d'étendre le calcul des fréquences jusqu'à 300 GHz (ce qui correspond à une longueur d'onde de 1mm et marque la limite du domaine millimétrique), et nous avons également élargi le catalogue à de nombreuses molécules. Ce travail a nécessité la prise en compte par le programme de hamiltoniens plus complets (voir ci-dessous); il a également fallu effectuer un très important travail, en grande partie bibliographique, de mise à jour et de complément des constantes moléculaires utilisées par le programme.

Les conditions physiques des milieux interstellaire ou circumstellaire, où s'observent les molécules, ne permettent pas le peuplement des niveaux électroniques ni même souvent des niveaux vibrationnels des molécules, si bien que les émissions moléculaires observées correspondent à des transitions entre niveaux rotationnels d'états vibrationnels peu excités (les raies observées en absorption peuvent, elles, faire intervenir des transitions vers des niveaux beaucoup plus excités, ainsi, par exemple, de nombreuses molécules circumstellaires se manifestent par des raies de transitions électroniques, en absorption dans les spectres optiques des étoiles). Les transitions, dites "de vibro-rotation", entre niveaux rotationnels d'états vibrationnels différents, tombent le plus souvent dans le domaine infra-rouge et sont responsables, par exemple, de très nombreuses raies en absorption dans le spectre des étoiles géantes rouges. Dans le domaine des ondes millimétriques, les raies moléculaires en émission, dans le milieu interstellaire ou circumstellaire, sont des transitions dipolaires électriques entre les niveaux rotationnels des états vibrationnels fondamental ou peu excités de l'état électronique fondamental des molécules.

Les fréquences des transitions rotationnelles sont calculées à partir des énergies des niveaux de rotation, qui sont les valeurs propres du hamiltonien purement rotationnel de la molécule. Celui-ci doit tenir compte (i) des effets de distorsion centrifuge, qui modifient les longueurs et les angles de liaison par rapport à la configuration d'équilibre de la molécule, (ii) du couplage rotation-vibration, qui traduit l'anharmonicité de l'oscillateur moléculaire. Ces effets sont suffisamment importants pour affecter les spectres millimétriques, en particulier pour les molécules légères de faibles moments d'inertie, mais ils sont cependant suffisamment petits par rapport à l'énergie rotationnelle pour que les termes correspondant du hamiltonien soient traités de façon perturbative. Dans le cas des molécules linéaires ou symétriques, on dispose alors d'expressions analytiques des énergies de rotation perturbées, et leur calcul ne nécessite que la connaissance des constantes moléculaires rotationnelles et de distorsion centrifuge. Dans le cas des molécules asymétriques en revanche, même si l'on pouvait négliger la distorsion centrifuge, il serait nécessaire de diagonaliser explicitement le hamiltonien pour calculer les énergies rotationnelles.

L'existence d'un moment angulaire électronique, de spin ou orbital, a pour conséquence la démultiplication des niveaux de rotation, ce qui a pour effet de compliquer le spectre de rotation, qui se présente alors sous forme de multiplets. C'est ce que l'on nomme habituellement la structure fine des raies de rotation. Enfin, la présence de spins nucléaires non nuls dans la molécule est responsable de la structure hyperfine des raies de rotation. La structure fine et la structure hyperfine sont des effets généralement faibles mais grâce à l'excellente résolution spectrale atteinte dans le domaine des observations millimétriques (100 kHz couramment pour des raies d'une fréquence de la centaine de GHz au moins) et en raison de l'étroitesse des raies moléculaires interstellaires (quelques centaines de kHz dans les nuages moléculaires froids comme TMC1) ces structures sont aisément observables sous la forme de raies multiples ou tout du moins de raies élargies.

Nous explicitons dans ce chapitre les expressions des divers hamiltoniens utilisés par notre programme de calcul des fréquences de raies moléculaires. Notre programme permet de calculer le spectre radio (jusqu'à des fréquences d'au moins 300 GHz) de la grande majorité des molécules interstellaires, et son utilisation est extrêmement simple: il suffit de fournir les constantes moléculaires. Un tableau récapitulatif de celles-ci est donné à la fin du chapitre et un paragraphe est consacré à une brève description de quelques méthodes de détermination, expérimentales ou théoriques, des constantes moléculaires.

II. EXPRESSION DU HAMILTONIEN

A. Le Hamiltonien rotationnel non perturbé

Comme nous l'avons mentionné un peu plus haut, les raies moléculaires millimétriques sont généralement des raies de rotation. Si l'on considère la molécule comme une toupie rigide, l'hamiltonien de rotation s'écrit :

$$H_r = 1/2 (P_a^2/I_a + P_b^2/I_b + P_c^2/I_c) \quad (I.1)$$

où (a,b,c) sont les axes principaux liés à la toupie, tels que les moments d'inertie correspondant soient rangés dans l'ordre $I_a < I_b < I_c$. Les P_i sont les composantes de l'opérateur moment angulaire.

1. Molécules linéaires

Dans le cas d'une molécule linéaire, le moment d'inertie I_a le long de l'axe de la molécule est nul et les deux autres moments sont égaux ($I_b = I_c \equiv I$). L'hamiltonien s'écrit alors

$$H_r = 1/2 P^2/I \quad (I.2)$$

Les fonctions propres de H_r sont les $|J,M\rangle$, fonctions propres communes à P^2 et P_Z où Z est un axe fixe dans l'espace, et l'énergie des niveaux de rotation est donnée par

$$E_J = hBJ(J+1) \quad \text{avec } B = 1/8\pi^2 I \quad (I.3)$$

Le photon étant un boson de spin 1, les règles de sélection des transitions dipolaires électriques, qui correspondent simplement à la conservation du moment cinétique, imposent $\Delta J = \pm 1$; le spectre de rotation d'une molécule linéaire est donc constitué d'une série de raies harmoniques de la fréquence fondamentale $2B$.

Les molécules interstellaires linéaires présentent une gamme étendue de moments d'inertie. CO, la plus abondante des molécules après H_2 (qui ne présente malheureusement pas de moment dipolaire électrique permanent), est une molécule légère. Sa constante rotationnelle vaut environ 57.5 GHz, si bien que ses transitions $J=1-0$ et $J=2-1$ tombent dans le domaine millimétrique, alors que la transition $J=3-2$, à 346 GHz appartient déjà au domaine submillimétrique. A l'opposé, la plus lourde des molécules linéaires détectées dans l'espace interstellaire à ce jour, HC_9N (la détection de $HC_{11}N$ est controversée), a une constante rotationnelle de 290 MHz, aussi ses transitions rotationnelles millimétriques (qui ne sont d'ailleurs pas observées) correspondent à des J de l'ordre de 200. La **Figure I.1** présente une série de raies harmoniques de molécule linéaire interstellaire : celle de HC_3N , que nous avons observée dans une enveloppe circumstellaire, IRC+10216, avec le radiotélescope de 30m de l'IRAM, au Pico Veleta.

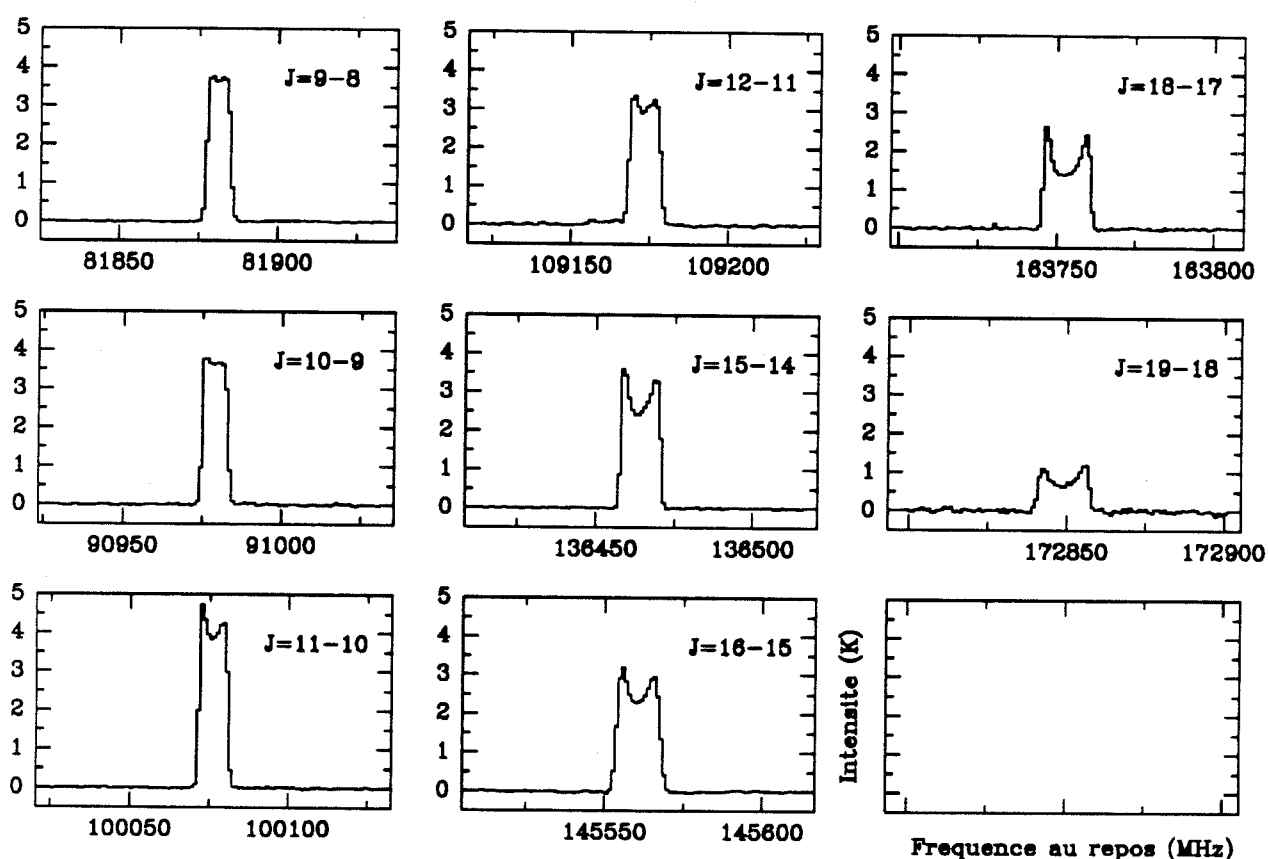


Figure I.1 : Raies de rotation d'une molécule linéaire, HC_3N , observées dans l'enveloppe circumstellaire IRC+10216 avec le radiotélescope de 30m de diamètre de l'IRAM. Les fréquences centrales des raies sont harmoniques de la fréquence fondamentale $2B = 9098$ MHz. La largeur des raies, constante en terme de vitesse, est proportionnelle à la fréquence. La forme et l'intensité des raies dépendent de l'excitation et de l'opacité des transitions.

2. Molécules symétriques

Dans le cas d'une toupie symétrique, un des axes principaux d'inertie, noté z , est confondu avec l'axe de symétrie de la molécule. Il s'agit de l'axe ' a ' pour une toupie de type "cigare" et de l'axe ' c ' pour une toupie de type "soucoupe". L'hamiltonien de rotation commute alors avec les opérateurs P^2 , P_z et P_z^2 où Z est un axe fixe dans l'espace:

$$H_r = 1/2 P^2/I_y + 1/2 (1/I_z - 1/I_y) P_z^2 \quad (I.4)$$

Il est diagonal dans la base des fonctions propres $|J,K,M\rangle$ communes aux trois opérateurs moment angulaire. Les valeurs propres de H_r sont les énergies rotationnelles :

$$E_{JK} = h [BJ(J+1) + (A-B)K^2] \quad \text{pour une toupie de type "cigare"} \quad (I.5)$$

$$E_{JK} = h [BJ(J+1) + (C-B)K^2] \quad \text{pour une toupie de type "soucoupe"} \quad (I.6)$$

où les constantes de rotation A , B , C sont définies comme précédemment (relation I.3).

Dans le cas d'une vraie toupie symétrique, le moment dipolaire permanent est parallèle à l'axe de symétrie de la molécule. D'un point de vue classique, le couplage du champ électrique du photon émis et du moment dipolaire de la molécule, qui se traduit par un couple perpendiculaire au dipôle, c'est-à-dire à l'axe de symétrie de la molécule, ne peut pas modifier la projection de la vitesse de rotation de la molécule le long de son axe de symétrie (il en est de même d'une toupie pesante, qui, sous l'action de la pesanteur, acquiert un mouvement de précession, sans modification de sa vitesse de rotation propre). Du point de vue quantique, c'est le nombre quantique K qui correspond à la projection du moment cinétique J , si bien qu'aux règles de sélection générales $\Delta J = \pm 1$, il faut ajouter, dans le cas de la toupie symétrique, $\Delta K = 0$. Le spectre de rotation non perturbé est donc identique à celui d'une molécule linéaire. Les toupies symétriques interstellaires ne sont pas très nombreuses. La quasi totalité comporte un groupement méthyle CH_3 (citons, parmi les plus abondantes, CH_3OH et CH_3CN). Leur constante rotationnelle B (la seule qui intervienne dans l'expression des fréquences des raies de rotation) est typiquement de l'ordre de quelques GHz et l'on observe dans le domaine millimétrique des transitions correspondant à des J allant jusqu'à quelques dizaines.

3. Molécules asymétriques

Pour une toupie asymétrique, H_r commute avec P^2 et P_z et la matrice est diagonale en J et en M; en revanche elle n'est pas diagonale en K. On emploie alors des pseudo nombres quantiques en indice de J pour désigner les niveaux d'énergie rotationnels de la molécule. Le système le plus employé est celui de King, Hainer et Cross (1943). Il décrit le comportement de la toupie asymétrique en terme de paramètre d'asymétrie K défini par :

$$K = (2B - A - C)/(A - C) \quad (I.7)$$

Les valeurs limites -1 et $+1$ de K correspondent respectivement aux toupies de forme "cigare" et "soucoupe". Les niveaux d'énergie sont notés J_{K-1K1} où les indices représentent respectivement les valeurs de K des niveaux d'énergie E_{JK} des toupies symétriques limites ainsi que l'indique la **Figure I.2**.

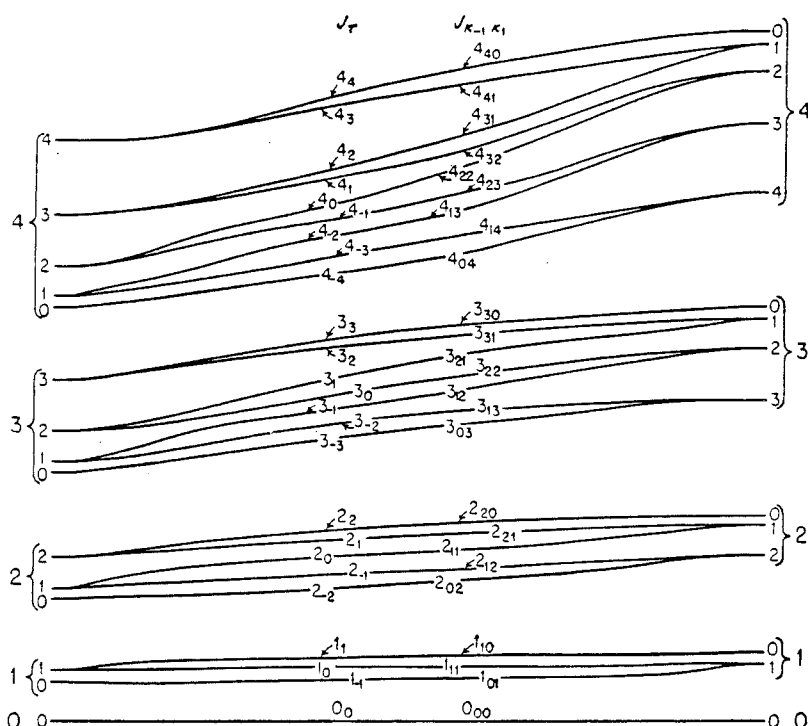


Figure I.2 : Comportement qualitatif des niveaux d'énergie d'une toupie asymétrique en fonction de la valeur de la constante rotationnelle B (d'après Townes et Schawlow, page 86). L'extrémité gauche du diagramme correspond au cas de la toupie symétrique type cigare ($B=C < A$, $K = -1$), l'extrémité droite au cas de la toupie symétrique de type soucoupe ($B=A > C$, $K = 1$).

Pour le calcul des valeurs propres de H_r , il est commode d'écrire l'hamiltonien sous la forme :

$$H_r = 1/2 (A+C)P^2 + 1/2 (A-C)H(K) \quad (I.8)$$

avec
$$H(K) = P_a^2 + K P_b^2 - P_c^2 \quad (I.9)$$

En utilisant les propriétés de symétrie de $H(K)$ et le fait que les seuls éléments de matrice non nuls sont les $\langle J, K | H(K) | J, K \rangle$ et les $\langle J, K | H(K) | J, K \pm 2 \rangle$, on peut montrer (voir par exemple Gordy and Cook, p. 172) qu'un changement de base permet d'écrire la matrice de $H(K)$ sous la forme d'une somme de quatre matrices tridiagonales, dont les valeurs propres sont appelées les énergies réduites $E(K)$ de la toupie asymétrique. Pour les faibles valeurs de J , il est possible de calculer explicitement ces valeurs propres et pour des valeurs de J plus élevées, on utilise la méthode de développement en fractions continues (ibid.).

En outre, pour les toupies légèrement asymétriques, les énergies des niveaux de rotation peuvent être développées avec une précision suffisante en puissances d'un paramètre d'asymétrie. Pour des toupies respectivement presque de type "cigare" ou de type "soucoupe" il est commode d'utiliser les paramètres d'asymétrie de Wang :

$$b_p = (C-B)/(2A-B-C) = (K+1)/(K-3) \quad (I.10)$$

et

$$b_o = (A-B)/(2C-B-A) = (K-1)/(K+3) \quad (I.11)$$

Quelle que soit l'orientation du moment dipolaire μ de la molécule, les règles de sélection sur le nombre quantique J sont bien sûr toujours $\Delta J = \pm 1$; en revanche les règles de sélection sur K_{-1} et K_1 dépendent du type de la transition dipolaire électrique : pour une transition de type "a", c'est-à-dire due à la composante μ_a du moment dipolaire, ΔK_{-1} est paire (en pratique, 0 et ± 2 , pour les transitions les plus intenses) et ΔK_1 est impaire (en pratique ± 1), c'est l'inverse pour une transition de type "c" et pour une transition de type "b", les deux indices doivent changer de parité (en pratique, ils varient de ± 1).

Les molécules interstellaires asymétriques sont très nombreuses et donnent lieu à des spectres très riches. Parmi les plus abondantes citons le formaldéhyde, H_2CO , une toupie presque symétrique de forme cigare, dont les raies centimétriques et millimétriques sont abondamment observées dans les nuages moléculaires, en émission et en absorption. La

géométrie et les niveaux d'énergie des échelles $K_{-1} = 0$ et 1 de la molécule de formaldéhyde, ainsi que les transitions couramment observées dans l'espace interstellaire, sont représentés dans la **Figure I.3**.

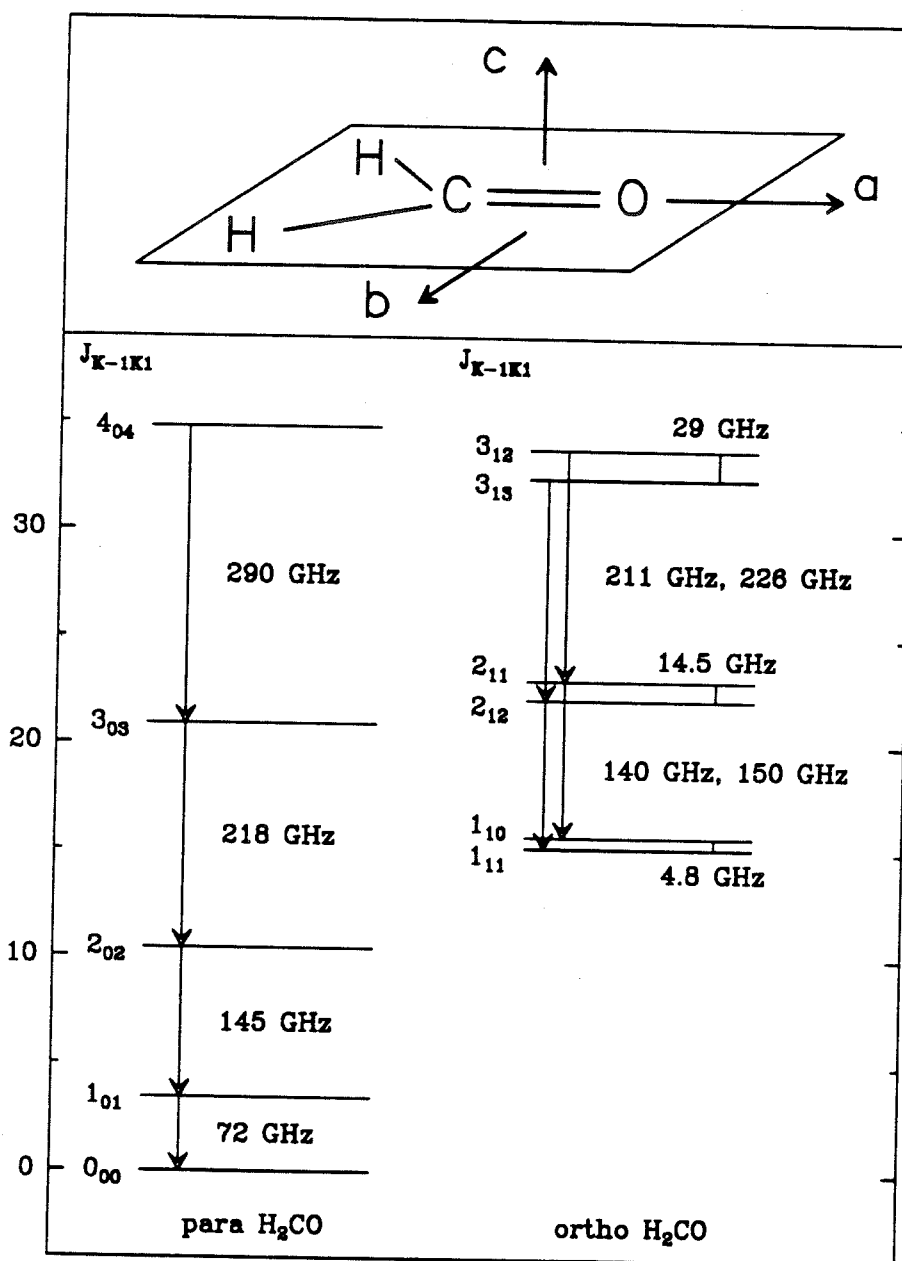


Figure I.3 : Géométrie et niveaux d'énergie rotationnelle du formaldéhyde. L'échelle $K_{-1} = 0$ appartient à la forme para (spins nucléaires des atomes d'hydrogène antiparallèles), alors que l'échelle $K_{-1} = 1$ appartient à la forme ortho (spins parallèles). Les transitions $\Delta J = -1$ correspondent à des raies du domaine millimétrique alors que les transitions $\Delta J = 0$ de l'échelle $K_{-1} = 1$ appartiennent au domaine centimétrique.

B. La distorsion centrifuge

La distorsion centrifuge est la modification des paramètres géométriques de la molécule (longueurs et angles de liaison) sous l'effet de forces centrifuges. Cette déformation est particulièrement importante pour les molécules légères qui ont de faibles moments d'inertie, c'est-à-dire de grandes constantes rotationnelles. Cependant, on ne peut pas non plus négliger la distorsion centrifuge pour les molécules lourdes car les termes correctifs qu'elle introduit dans l'expression de l'énergie rotationnelle augmentent rapidement avec le nombre quantique de rotation, et, comme nous l'avons vu, les transitions rotationnelles millimétriques de ce type de molécules font intervenir des niveaux de J élevés.

L'hamiltonien classique d'une molécule polyatomique en rotation et en vibration peut s'écrire :

$$H = 1/2 \sum_{\alpha,\beta} \mu_{\alpha\beta} P_{\alpha} P_{\beta} + 1/2 \sum_{i,j} G_{ij} p_i p_j + \sum_{k,l} f_{kl} R_k R_l \quad (I.12)$$

où les R_k sont les déplacements par rapport à l'équilibre des coordonnées internes de la molécule (longueurs et angles de liaison), les p_i les moments conjugués et les P_{α} les composantes du moment angulaire total. Le premier terme représente l'énergie rotationnelle du système et les $\mu_{\alpha\beta}$ dépendent des coordonnées de vibration, les deux derniers termes représentent respectivement l'énergie cinétique et l'énergie potentielle de vibration dans l'approximation harmonique.

Si l'on suppose en outre que la molécule ne vibre pas, les p_i et leurs dérivées par rapport au temps sont nulles, les $\mu_{\alpha\beta}$ se développent en série au premier ordre en R_i par rapport aux valeurs à l'équilibre $\mu_{\alpha\beta}^e$ et l'hamiltonien s'écrit :

$$H = 1/2 \sum_{\alpha,\beta} \mu_{\alpha\beta}^e P_{\alpha} P_{\beta} + 1/4 \sum_{\alpha,\beta,\lambda,\mu} \tau_{\alpha\beta\lambda\mu} P_{\alpha} P_{\beta} P_{\lambda} P_{\mu} \quad (I.13)$$

Le premier terme représente l'énergie de la toupie rigide et le second l'énergie de distorsion centrifuge. Le terme de distorsion centrifuge peut s'exprimer simplement si l'on choisit pour axes $\alpha, \beta, \lambda, \mu$ le système des axes principaux d'inertie de la toupie rigide, x, y, z .

On peut montrer (voir par exemple Gordy and Cook p. 218) que pour les molécules de symétrie orthorhombique ou, au premier ordre d'approximation, pour les molécules quelconques, l'hamiltonien s'écrit:

$$H = (\mathcal{A}P_z^2 + \mathcal{B}P_x^2 + \mathcal{C}P_y^2) + 1/4 \sum_{\alpha,\beta} \tau'_{\alpha\alpha\beta\beta} P_\alpha^2 P_\beta^2 \quad (\text{I.14})$$

où les constantes de rotation corrigées \mathcal{A} , \mathcal{B} , \mathcal{C} dépendent des termes de distorsion du type $\tau_{\alpha\beta\alpha\beta}$. Il n'y a alors plus que six constantes de distorsion explicites. L'énergie de distorsion centrifuge du premier ordre peut se mettre sous la forme :

$$E_d^{(1)} = 1/8 \sum_{\alpha,\beta} \tau'_{\alpha\alpha\beta\beta} \langle P_\alpha^2 P_\beta^2 + P_\beta^2 P_\alpha^2 \rangle \quad (\text{I.15})$$

où les valeurs moyennes sont calculées dans la base des fonctions propres de la toupie rigide.

1. Molécules linéaires

Dans le cas d'une molécule linéaire, il n'y a qu'un seul axe de distorsion, l'axe de la molécule, et l'hamiltonien de distorsion s'écrit au premier ordre:

$$H_d^{(1)} = -(16\pi^4/h^3) DP^4 \quad (\text{I.16})$$

où D est la constante de distorsion centrifuge.

(Il est évident que l'énergie de distorsion centrifuge doit être négative car la distorsion centrifuge a pour effet d'augmenter les longueurs des liaisons, donc de diminuer la constante rotationnelle effective; il est clair également que cet effet est d'autant plus important que la vitesse de rotation de la molécule est grande, si bien que l'énergie de distorsion centrifuge doit être au moins en $J^2(J+1)^2$).

Avec la règle de sélection $\Delta J = \pm 1$, les fréquences des transitions rotationnelles sont de la forme :

$$\nu(J+1 \rightarrow J) = 2B(J+1) - 4D(J+1)^3 \quad (\text{I.17})$$

Pour une molécule légère comme CO, D vaut 0,18 MHz donc pour la transition $J=1-0$, le terme de distorsion centrifuge vaut 700 kHz, soit une correction relative de $6 \cdot 10^{-6}$, ce qui est parfaitement mesurable sur les raies interstellaires.

De façon générale, la constante de distorsion centrifuge est de l'ordre de B^3/ω^2 , où ω est la fréquence de vibration classique de la molécule. C'est ainsi que pour une famille de molécules linéaires, (comme les cyanopolyynes, HC_nN , par exemple), qui ont des forces de liaisons analogues, les constantes de distorsion centrifuge varient comme B^2 . Cette loi de variation est bien sûr d'autant mieux vérifiée que la molécule est plus longue. Elle a été employée, par exemple, par Broten *et al* (1978) pour estimer la constante de distorsion de HC_9N , qu'ils cherchaient à détecter dans l'espace interstellaire, à partir de celle de HC_7N .

Remarque : D'un point de vue classique, la distorsion centrifuge ne doit bien sûr pas dépendre du sens de rotation de la toupie. Du point de vue quantique, cela se traduit par l'absence dans l'hamiltonien de puissances impaires de l'opérateur P . Si l'on développe le terme de distorsion centrifuge à des ordres supérieurs, les énergies de rotation s'écrivent :

$$E_J = h[BJ(J+1) - DJ^2(J+1)^2 + HJ^3(J+1)^3 + LJ^4(J+1)^4 + \dots] \quad (I.18)$$

2. Molécules symétriques

Dans le cas des toupies symétriques, certains des coefficients τ' sont égaux et l'énergie de distorsion au premier ordre ne dépend que de trois combinaisons des τ' que l'on peut mettre sous la forme :

$$E_d^{(1)} = -h D_J J^2(J+1)^2 -h D_{JK} J(J+1) K^2 -h D_K K^4 \quad (I.19)$$

Le premier terme, en D_J , toujours négatif, correspond à la diminution de la constante rotationnelle effective B en raison de l'allongement de la molécule suivant son axe de symétrie, lors d'une rotation autour d'un axe perpendiculaire à celui-ci. Le troisième terme, en D_K , également négatif, traduit l'augmentation des longueurs de liaisons et l'ouverture des angles de liaisons dues à la rotation de la molécule autour de son axe de symétrie. Le deuxième terme, en D_{JK} , exprime le couplage entre les deux rotations par l'intermédiaire de la déformation de la molécule. Il peut être de l'un ou l'autre signe.

Compte-tenu des règles de sélection, les fréquences des transitions rotationnelles s'écrivent :

$$\nu(J+1 \rightarrow J) = 2B(J+1) - 4D_J(J+1)^3 - 2D_{JK}(J+1)K^2 \quad (\text{I.20})$$

Le spectre rotationnel des molécules symétriques diffère donc de celui des molécules linéaires par l'existence de $(J+1)$ composantes dont l'espacement varie comme K^2 (voir la **Figure I.4**)

Remarque: Les développements aux ordres supérieurs du hamiltonien de distorsion centrifuge des molécules symétriques ne font intervenir que des puissances de P^2 et de P_z^2 .

Pour une molécule comme CH_3CN , $B=9200$ MHz, $D_J = 4 \cdot 10^{-3}$ MHz et $D_{JK} = 0,18$ MHz. Pour la transition $J=5-4$, qui correspond à une fréquence d'environ 92 GHz, la correction en D_J est de 1.9 MHz et les séparations entre les composantes K , données par le terme en D_{JK} , sont de plusieurs MHz ce qui rend cette structure très visible sur les spectres de raies interstellaires, comme le prouve celui présenté dans la **Figure I.4**. En revanche le terme de distorsion centrifuge d'ordre supérieur, H_J , introduit une correction de $4 \cdot 10^{-5}$ MHz que l'on peut négliger.

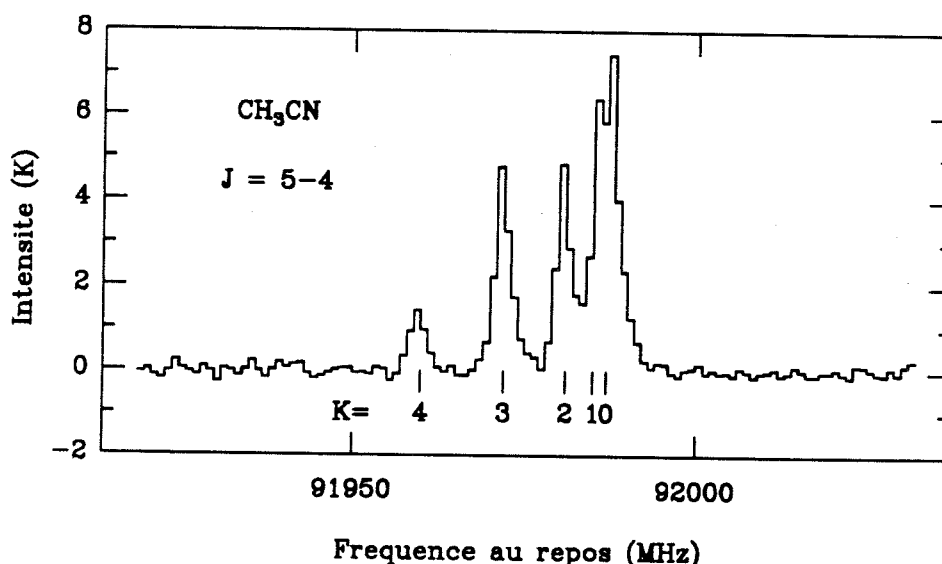


Figure I.4 : Transition rotationnelle $J = 5-4$ du cyanure de méthyle, CH_3CN , observée dans le nuage moléculaire Orion A avec le télescope de 30m de l'IRAM. Les composantes $K = 0$ et $K = 1$ ne sont pas résolues. Les autres sont en revanche bien séparées.

3. Molécules asymétriques

Dans le cas des toupies asymétriques, l'énergie de distorsion centrifuge s'exprime en fonction des valeurs moyennes $\langle P^n \rangle$ et $\langle P_z^n \rangle$ ($n=2,4$) dans la base des fonctions propres de la toupie asymétrique rigide et des valeurs propres $E_r = A\langle P_z^2 \rangle + B\langle P_x^2 \rangle + C\langle P_y^2 \rangle$. On peut montrer (cf. Gordy and Cook, p. 221) que cette énergie ne dépend que de cinq combinaisons des $\tau'_{\alpha\alpha\beta\beta}$. En suivant Watson, on peut utiliser pour le calcul des niveaux d'énergie un hamiltonien qui ne dépend, au premier ordre, que de cinq constantes de distorsion centrifuge et qui s'écrit sous une forme très analogue à celle utilisée pour les toupies symétriques, moyennant une nouvelle redéfinition des constantes de rotation :

$$H' = \mathcal{A} P_z^2 + \mathcal{B} P_x^2 + \mathcal{C} P_y^2 - \Delta_J P^4 - \Delta_{JK} P^2 P_z^2 - \Delta_K P_z^4 - 2\delta_J P^2 (P_x^2 - P_y^2) - \delta_K [P_z^2 (P_x^2 - P_y^2) + (P_x^2 - P_y^2) P_z^2] \quad (I.21)$$

avec

$$\mathcal{A} = A + 16R_6 \quad (I.22)$$

$$\mathcal{B} = B - 16R_6(A-C)/(B-C) \quad (I.23)$$

$$\mathcal{C} = C + 16R_6(A-B)/(B-C) \quad (I.24)$$

$$R_6 = [\tau_{xxxx} + \tau_{yyyy} - 2(\tau_{xxyy})](h/2\pi)^4/64 \quad (I.25)$$

(On retrouve l'expression du hamiltonien d'une toupie symétrique lorsque R_6 , δ_J et δ_K sont nuls).

Pour les molécules de faibles moments d'inertie, il est nécessaire de faire intervenir dans le calcul des fréquences des transition rotationnelles des termes de distorsion centrifuge d'ordres encore supérieurs. L'hamiltonien de Watson est le plus utilisé (voir Gordy and Cook, p. 229). Il présente l'avantage de ne comporter que des termes $(K|K)$ et $(K|K \pm 2)$ dans la base des fonctions propres de la toupie symétrique $|J,K,M\rangle$. Il peut donc être commodément diagonalisé par la méthode des fractions continues.

C. Structure fine

La structure fine des raies de rotation se manifeste lorsque la molécule présente un moment angulaire électronique, orbital ou de spin, non nul. La nature du spectre dépend alors du type d'état électronique et des couplages entre les moments angulaires électroniques et de rotation de la molécule. Nous nous sommes limités au cas, de loin le plus fréquent et le plus simple, des molécules linéaires n'ayant qu'un ou deux électrons non appariés.

Les molécules sont classées selon leur état électronique, défini par deux nombres quantiques, Λ , qui est la valeur absolue de la projection du moment électronique orbital L sur l'axe de la molécule et S le nombre quantique de spin. Conventionnellement, on désigne par Σ , Π et Δ les états correspondant à $\Lambda = 0, 1, 2$. La multiplicité $2S+1$ figure en indice supérieur gauche. Si la molécule ne comporte qu'un seul électron célibataire, $2S+1 = 2$, si elle en comporte deux, $2S+1 = 1$ ou 3 . Lorsque Λ n'est pas nul, on définit un nombre quantique supplémentaire Σ , qui est la projection de S sur l'axe de la molécule et l'on indique en indice inférieur droit la valeur de $\Omega = |\Lambda + \Sigma|$.

Pour la très grande majorité des molécules, les couplages entre moments angulaires peuvent être classés en trois types:

- le cas (a) de Hund : le champ magnétique équivalent engendré par la rotation de la molécule est faible par rapport à celui généré par le mouvement orbital électronique, si bien que L et S sont fortement couplés à l'axe internucléaire. $\Omega = |\Lambda + \Sigma|$ est un bon nombre quantique et le moment angulaire total (à l'exclusion du spin nucléaire) est $J = \Omega + O$, où O désigne le moment angulaire de rotation de la molécule (voir **Figure I.5**).

- le cas (b) de Hund : quand $\Lambda=0$ ou quand le champ magnétique équivalent créé par la rotation de la molécule est fort, le spin électronique S est couplé à $N = \Lambda + O$ pour former la résultante J (voir **Figure I.6**).

- le cas intermédiaire entre (a) et (b).

Notre programme de calcul de structure fine des raies de rotation est limité aux spectres des molécules $^2\Sigma$, $^3\Sigma$ et $^2\Pi$.

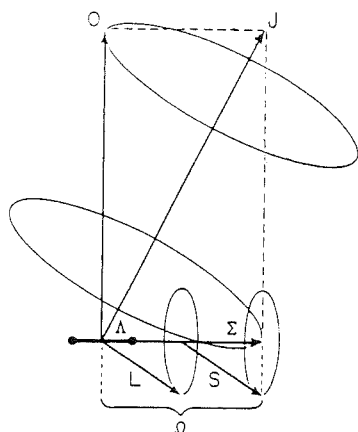


Figure 1.5 : Représentation vectorielle du cas de couplage (a) de Hund (Gordy and Cook, page 92). Le moment orbital et le spin électroniques, L et S , précessent rapidement autour de l'axe moléculaire. Celui-ci et le moment orbital moléculaire O , précessent lentement autour du moment angulaire total J .

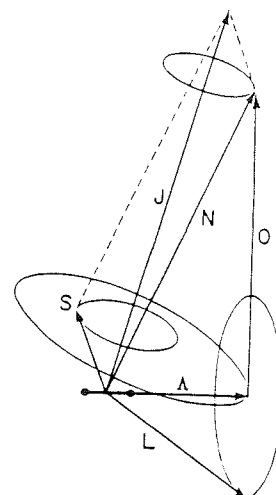


Figure 1.6 : Représentation vectorielle du cas de couplage (b) de Hund (Gordy and Cook, page 94). Le moment orbital électronique, L , précesse rapidement autour de l'axe moléculaire. Le spin électronique S et le moment angulaire orbital total N précessent lentement autour de leur résultante, le moment angulaire total J .

1. Les molécules $^2\Sigma$

Elles suivent le cas (b) de Hund : elles n'ont pas de moment électronique orbital et le spin électronique est couplé à l'axe de rotation O de la molécule. En bonne approximation, le champ magnétique équivalent généré par la rotation est directement proportionnel au moment angulaire de rotation N (ici $\equiv O$) et l'hamiltonien d'interaction entre la rotation moléculaire et le spin électronique s'écrit :

$$H_M = -\gamma \mathbf{S} \cdot \mathbf{N} = 1/2 \gamma (\mathbf{J}^2 - \mathbf{S}^2 - \mathbf{N}^2) \quad (\text{I.26})$$

où γ est la constante d'interaction spin-rotation. Cette interaction peut être traitée comme une perturbation de l'énergie de rotation; au premier ordre, elle a pour effet de dédoubler les niveaux de rotation (sauf le niveau $N=0$) en deux composantes d'énergies :

$$E(J=N-1/2) = BN(N+1) - 1/2 \gamma (N+1) \quad (\text{I.27})$$

$$E(J=N+1/2) = BN(N+1) + 1/2 \gamma N \quad (\text{I.28})$$

Les règles de sélection des transitions dipolaires électriques les plus intenses sont $\Delta N = \pm 1$ et $\Delta J = \pm 1$. Les raies de rotation des molécules $^2\Sigma$ se présentent donc sous la forme de doublets, de séparation γ constante, dont la fréquence centrale est un multiple entier de $2B$ (voir la **Figure I.7**).

Les effets de distorsion centrifuge des molécules $^2\Sigma$ peuvent être calculés en négligeant le spin électronique, ainsi qu'il a été exposé dans le paragraphe sur la distorsion centrifuge. Au premier ordre, les fréquences des raies du doublet s'écrivent :

$$\nu_+(J+1 \rightarrow J) = 2B(N+1) - 4D(N+1)^3 + \gamma/2 \quad (\text{I.29})$$

$$\nu_-(J+1 \rightarrow J) = 2B(N+1) - 4D(N+1)^3 - \gamma/2 \quad (\text{I.30})$$

Parmi les molécules $^2\Sigma$ détectées dans l'espace interstellaire, citons CN, C_3N , CCH et C_4H , ainsi que la première nouvelle molécule, peut-être identifiée à HSiCC, détectée avec le télescope de 30m de diamètre de l'IRAM dans l'enveloppe de l'étoile carbonée IRC+10216 (voir le chapitre 2). La **Figure I.7** représente les niveaux d'énergie et le spectre de C_4H , observé dans l'enveloppe circumstellaire IRC+10216. Signalons qu'il existe également des molécules interstellaires non linéaires de type doublet Σ , comme HNO.

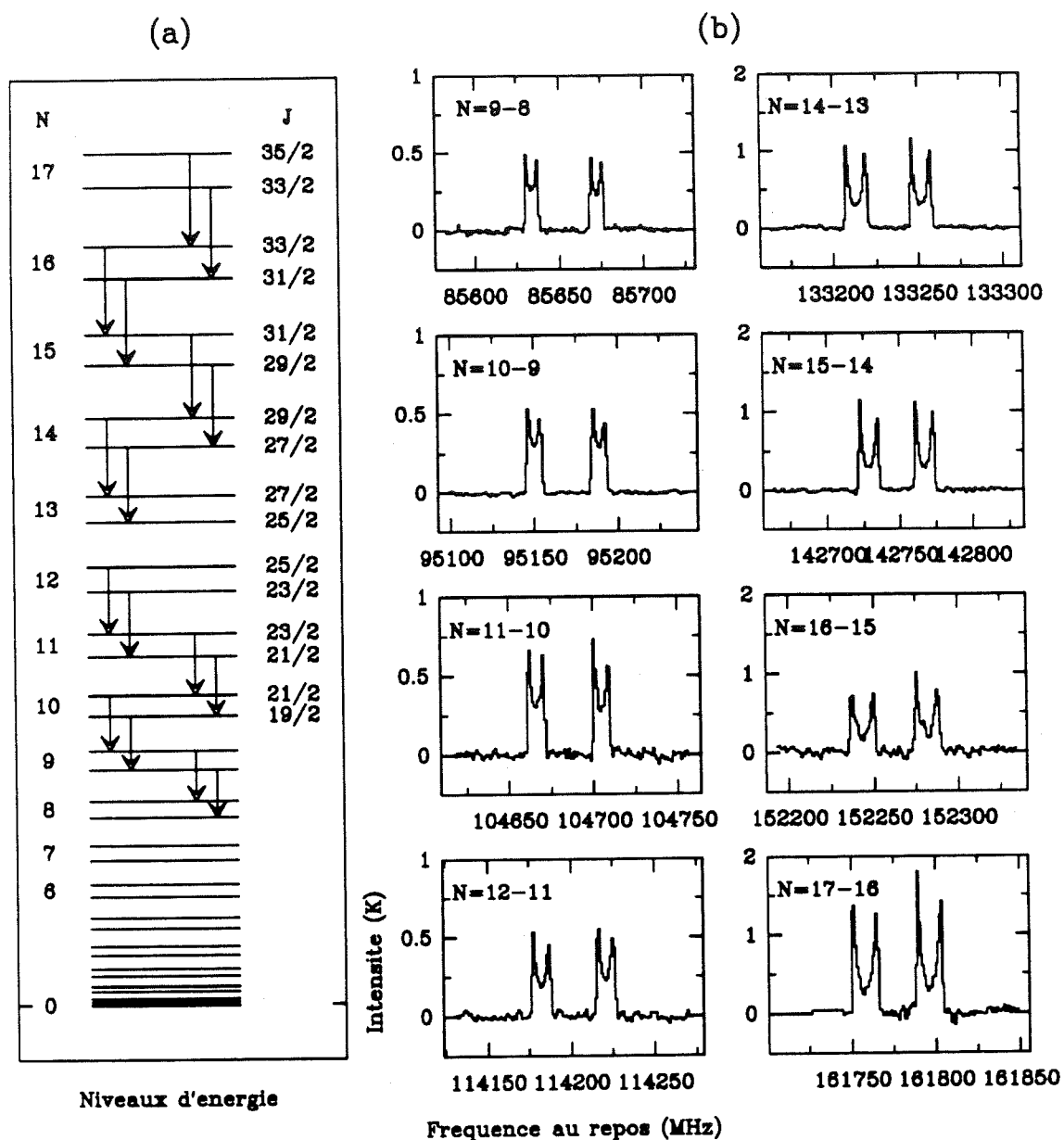


Figure 1.7 : (a) Niveaux d'énergie d'une molécule linéaire dans un état $^2\Sigma$, (la séparation des doublets est très exagérée). Les transitions dipolaires électriques, dont les spectres sont présentés en (b), sont symbolisées par des flèches. (b) Doublets $\Delta N = -1$ de la molécule C_4H , observés dans l'enveloppe IRC+10216 avec le 30m de l'IRAM. On remarquera que la séparation entre les raies est constante.

2. Les molécules $^3\Sigma$

Leurs niveaux de rotation sont démultipliés en triplets, quelquefois appelés triplets ρ , qui correspondent aux trois orientations possibles du spin électronique S : les valeurs possibles du nombre quantique de moment angulaire total sont $J = N+1, N, N-1$. En outre, il apparait deux termes d'interaction magnétique supplémentaires, l'un dû à l'interaction spin-spin des deux électrons non appariés, l'autre au couplage entre l'état électronique fondamental $^3\Sigma$ et les états électroniques excités (Π, Δ, \dots). Ces deux termes sont représentés par une constante d'interaction commune λ . L'interaction spin-spin tend à aligner les spins le long de l'axe internucléaire, si bien que les molécules $^3\Sigma$ suivent un cas de couplage intermédiaire entre les cas (a) et (b). En suivant les calculs de Miller et de Townes, les énergies des sous-niveaux des triplets peuvent s'écrire :

$$E_{(J=N+1)} = BN(N+1) + B(2N+3) + \lambda - 3\gamma/2 - [\lambda^2 - 2\lambda(B-\gamma/2) + (2N+3)^2(B-\gamma/2)^2]^{1/2} \quad (I.31)$$

$$E_{(J=N)} = BN(N+1) + 2\lambda - \gamma \quad (I.32)$$

$$E_{(J=N-1)} = BN(N+1) - B(2N-1) + \lambda - 3\gamma/2 - [\lambda^2 - 2\lambda(B-\gamma/2) + (2N-1)^2(B-\gamma/2)^2]^{1/2} \quad (I.33)$$

Ces formules ne tiennent pas compte de la distorsion centrifuge. Au premier ordre d'approximation, celle-ci peut être incluse en remplaçant B par $B - DN(N+1)$ et λ par $\lambda \pm \lambda_1 N(N+1)$.

Les règles de sélection sont $\Delta N = \pm 1$ et $\Delta J = 0, \pm 1$.

Parmi les molécules interstellaires $^3\Sigma$ citons O_2 (qui ne possède pas de moment dipolaire permanent, et dont on ne peut donc pas observer de spectre rotationnel), SO , ainsi qu'une molécule récemment identifiée dans le nuage sombre TMC1 et dans l'enveloppe circumstellaire IRC+10216, CCS (Saito et al, 1987; Cernicharo et al, 1987). Les niveaux d'énergie de cette dernière espèce sont représentés dans la **Figure I.8**.

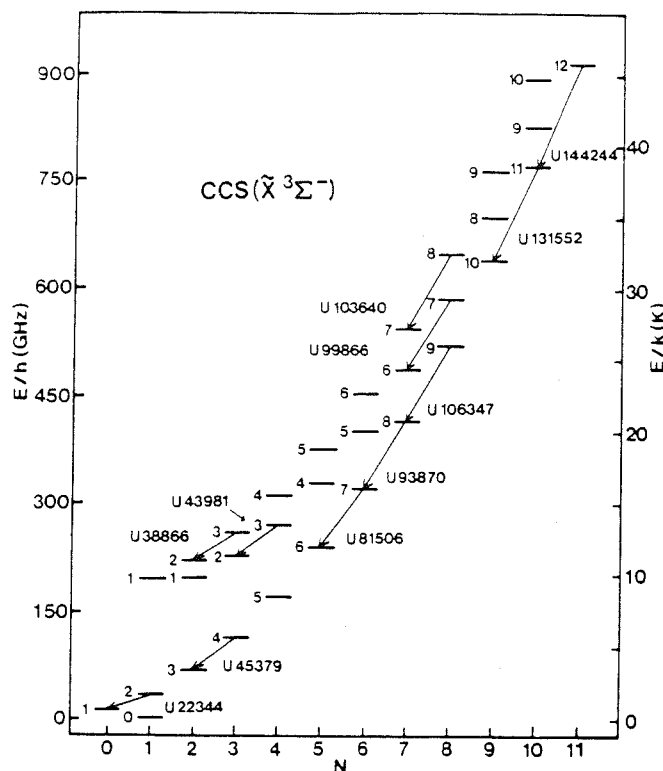


Figure 1.8 : Diagramme des niveaux d'énergie de CCS (d'après Saito et al, 1987). Les valeurs de J sont indiquées à côté des niveaux. Les premières transitions détectées dans le milieu interstellaire (TMCI et SgrB2) sont représentées par des flèches.

3. Les molécules $^2\Pi$

Les molécules $^2\Pi$ lourdes suivent le cas de couplage (a). Les plus légères correspondent à un couplage intermédiaire, et même, pour les niveaux rotationnels élevés, au cas de couplage (b). En effet, l'interaction de la rotation moléculaire avec les mouvements électroniques a pour effet de découpler partiellement S de l'axe internucléaire et d'éloigner du cas idéal (a). Cette interaction a également pour effet de découpler partiellement L et donc de lever la dégénérescence en $\pm \Lambda$, ce qui dédouble chaque niveau de rotation (c'est le dédoublement Λ).

Quand le découplage du spin est faible, c'est-à-dire quand $2JB \ll |\Lambda A|$, où A est la constante de couplage spin-orbite, l'énergie des niveaux de rotation peut s'écrire :

$$E_J = h B_{\text{eff}} J(J+1) \quad \text{avec} \quad J = \Omega, \Omega+1, \dots \quad (\text{I.34})$$

et au premier ordre d'approximation,

$$B_{\text{eff}} = B(1 \pm B/A + \dots) \quad (\text{I.35})$$

où le signe – correspond à $\Omega = 1/2$ et le signe + à $\Omega = 3/2$. A donne donc la différence d'énergie entre les échelles ${}^2\Pi_{1/2}$ et ${}^2\Pi_{3/2}$.

Au premier ordre d'approximation, le doublet Λ est symétrique par rapport au niveau non perturbé et l'énergie de séparation du doublet s'écrit :

$$q_{\Lambda} (J+1/2) \quad \text{quand } \Omega = 1/2 \quad (\text{I.36})$$

$$2q_{\Lambda} (B/A)^2 (J-1/2) (J+1/2) (J+3/2) \quad \text{quand } \Omega = 3/2 \quad (\text{I.37})$$

Les termes de distorsion centrifuge des états ${}^2\Pi$ ne peuvent plus s'exprimer comme dans le cas des molécules ${}^1\Sigma$. A l'ordre le plus bas, ils se mettent sous la forme :

$$D [(J-1/2) (J+1/2)^2 (J+3/2) + 1] \quad (\text{I.38})$$

Les transitions rotationnelles dipolaires électriques s'effectuent entre les niveaux inférieurs ou supérieurs des doublets voisins (voir **Figure I.9**). Le spectre de rotation des molécules ${}^2\Pi$ se présente donc sous la forme de doublets dont la fréquence moyenne est un multiple demi-entier de $2B_{\text{eff}}$ et dont la séparation augmente avec J .

Parmi les molécules interstellaires doublet Π "lourdes" citons C_3H (voir **Figure I.9**), ainsi que deux autres membres de la famille C_nH , C_5H et C_6H , que nous avons identifiés dans l'enveloppe de l'étoile carbonée IRC+10216, grâce à leur spectre de rotation (voir ci-après).

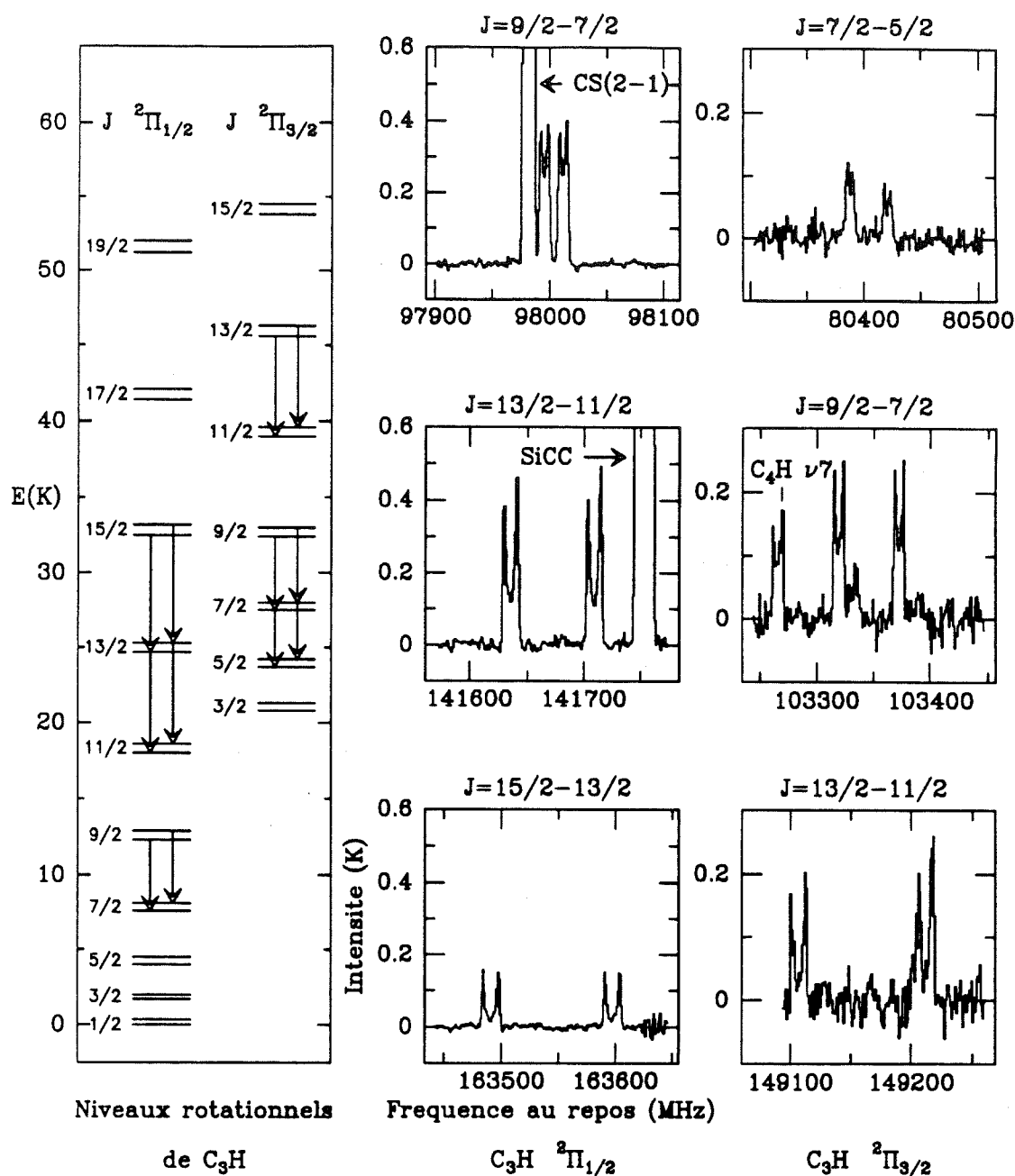


Figure I.9 : Niveaux d'énergie rotationnelle de C_3H (d'après Thaddeus et al, 1985a) et doublets des échelles $^2\Pi_{1/2}$ et $^2\Pi_{3/2}$ observés dans l'enveloppe circumstellaire IRC+10216. On remarquera que la séparation des deux composantes des doublets augmente rapidement avec J .

Les molécules $^2\Pi$ très légères, comme CH ou OH, ont de grandes constantes de rotation et de faibles constantes de couplage spin-orbite, si bien que $2JB > |A|$. Elles présentent un couplage intermédiaire entre le cas (a) et le cas (b), et même, pour les grandes valeurs de J , un couplage de type (b). Les expressions des énergies rotationnelles et de la séparation entre niveaux du doublet sont beaucoup plus complexes et peuvent être par

exemple trouvées dans Gordy and Cook, p. 105 et 106. Dans le cas de CH et OH, les transitions rotationnelles tombent dans le domaine infra-rouge mais on peut, en revanche, observer en radio les transitions $J \rightarrow J$ (ou $N \rightarrow N$) entre les 2 niveaux Λ . Les spectres correspondants présentent une structure hyperfine complexe, due au spin nucléaire de H. (Il en est d'ailleurs de même pour les autres molécules ${}^2\Pi$ de la famille C_nH).

D. Structure hyperfine

La structure hyperfine nucléaire des spectres rotationnels provient des interactions magnétiques et/ou électriques des champs moléculaires avec les moments nucléaires. Elle ne concerne bien sûr que les molécules contenant des atomes de spin nucléaire non nul.

Pour les molécules ne possédant pas de moment angulaire électronique, l'interaction principale est celle du champ moléculaire avec les moments électriques quadrupolaires des noyaux, qui sont non nuls pour les noyaux de spin $> 1/2$. Pour les molécules interstellaires, les noyaux intéressés sont essentiellement ceux de l'isotope principal ${}^{14}\text{N}$ (spin $I=1$) et des isotopes rares D ($I=1$), ${}^{17}\text{O}$ ($I=5/2$) et ${}^{33}\text{S}$ ($I=3/2$). Pour les noyaux de spin $1/2$, comme H, ${}^{13}\text{C}$, ${}^{15}\text{N}$, ${}^{29}\text{Si}$, la structure hyperfine est due à l'interaction du spin nucléaire avec le faible champ magnétique engendré par la rotation de la molécule. Pour les noyaux de spin $> 1/2$ cet effet existe bien sûr également, mais il est généralement beaucoup moins important que le couplage quadrupolaire.

Pour les molécules qui possèdent un moment angulaire électronique, la structure hyperfine est essentiellement due au couplage, de type magnétique, entre le spin nucléaire et le moment angulaire électronique, orbital ou de spin.

Nous nous limiterons ici au calcul des structures hyperfines quadrupolaires dues à un noyau unique ou à deux noyaux lorsque l'un des couplages prédomine. En ce qui concerne le couplage magnétique, seul le cas des molécules linéaires, autres que ${}^1\Sigma$, ne comportant qu'un atome à spin nucléaire non nul, est traité.

1. Couplage quadrupolaire par un noyau unique

Classiquement, l'énergie d'interaction entre une distribution de charges électriques non sphérique, celle du noyau, et un champ électrique non uniforme, créé par les charges électroniques, s'écrit :

$$E = E_0 + 1/2 (\partial^2 V / \partial z^2) eQ^* \quad (I.39)$$

avec

$$Q^* = (1/e) \int \rho_n (3z_n^2 - r_n^2) d\tau_n \quad (I.40)$$

où z est l'axe du spin nucléaire et ρ_n la densité de charges nucléaires.

La correspondance avec l'expression du hamiltonien n'est pas immédiate car Q^* et le spin nucléaire I ne sont pas des observables. I est couplé au moment angulaire de rotation de la molécule, J , pour former la résultante F . Au premier ordre cependant, I^2 reste une constante du mouvement, si bien que les bons nombres quantiques sont F , M_F , J et I .

L'hamiltonien d'interaction quadrupolaire, dans le cas du couplage par un noyau unique se met sous la forme (voir Gordy and Cook p. 246 et suivantes) :

$$H_Q = e Q q_J [3(I \cdot J)^2 + 3/2(I \cdot J) - I^2 \cdot J^2] / 2IJ(2I-1)(2J-1) \quad (I.41)$$

où Q est le moment quadrupolaire et q_J est une constante de couplage qui dépend du type de la molécule.

L'énergie de couplage quadrupolaire, déterminée par un calcul perturbatif du premier ordre, est généralement écrite sous la forme :

$$E_Q = [2/J(J+1)] Y(J,I,F) \sum_{g=a,b,c} \chi_{gg} \langle J, i | P_g^2 | J, i \rangle \quad (I.42)$$

avec

$$Y(J,I,F) = [3/4 C(C+1) - I(I+1) J(J+1)] / [2 (2J-1) (2J+3) I (2I-1)] \quad (I.43)$$

et

$$C = F(F+1) - J(J+1) - I(I+1) \quad (I.44)$$

et où les trois constantes de couplage quadrupolaire χ_{gg} , relatives aux axes principaux d'inertie de la molécule, satisfont à la relation :

$$\chi_{aa} + \chi_{bb} + \chi_{cc} = 0 \quad (\text{I.45})$$

Les éléments de matrice $\langle J, i | P_g^2 | J, i \rangle$ sont calculés dans la base des fonctions d'onde de la toupie non perturbée. Ils peuvent être évalués explicitement pour les molécules linéaires ou symétriques, mais pour les toupies asymétriques, le calcul des termes de J élevés fait appel à des méthodes numériques.

a. Cas des molécules linéaires

Le gradient de champ électrique moléculaire est symétrique par rapport à l'axe (a) de la liaison. Les constantes de couplage quadrupolaire sont alors telles que :

$$\chi_{bb} = \chi_{cc} = -1/2 \chi_{aa} \equiv -1/2 \chi \quad (\text{I.46})$$

avec $P_a^2 \equiv 0$ et $\langle J, i | P_b^2 + P_c^2 | J, i \rangle = J(J+1)$, il vient

$$E_Q = -\chi Y(J, I, F) \quad (\text{I.47})$$

Les règles de sélection des transitions hyperfines du spectre rotationnel sont $\Delta J = \pm 1$, $\Delta F = 0, \pm 1$, et $\Delta I = 0$, si bien que les composantes hyperfines ont pour fréquences :

$$\nu(J+1, I, F' \rightarrow J, I, F) = \nu_0 - \chi [Y(J+1, I, F') - Y(J, I, F)] \quad (\text{I.48})$$

où ν_0 serait la fréquence rotationnelle en l'absence de couplage quadrupolaire.

Contrairement aux composantes de structure fine, qui ont la même intensité, les composantes de structure hyperfine ont des intensités relatives qui dépendent fortement des valeurs de F et F' ; les raies ($\Delta F = \Delta J$) sont les plus intenses.

Pour les transitions où $J > I$, l'évolution de la structure hyperfine quand J augmente est assez uniforme :

- les intensités des composantes ($F-1 \rightarrow F$) et ($F \rightarrow F$) diminuent rapidement (en J^{-4} et en J^{-2} respectivement)

- les $2I+1$ composantes ($F+1 \rightarrow F$) restent fortes (leurs intensités sont proportionnelles à F) mais ont des fréquences de plus en plus voisines, si bien que pour les grandes valeurs de J une seule raie est observée, sauf lorsque le couplage est très grand.

Remarque : La transition $J=1-0$ ne présente que trois composantes, quelle que soit la valeur de I .

Parmi les molécules interstellaires linéaires dont la structure hyperfine quadrupolaire peut être aisément observée, citons HCN ($\chi = -4.7$ MHz), $C^{17}O$ ($\chi = 4.4$ MHz), $C^{33}S$ ($\chi = 12.8$ MHz).

b. Cas des molécules symétriques

Lorsque le couplage quadrupolaire est dû à un noyau unique, celui-ci est nécessairement situé sur l'axe de symétrie de la molécule. L'énergie de couplage quadrupolaire s'écrit alors :

$$E_Q = \chi [(3K^2 / (J+1)J) - 1] Y(J,I,F) \quad (I.49)$$

où χ est la constante de couplage par rapport à l'axe de symétrie.

Les règles de sélection s'écrivent : $\Delta J=0, \pm 1$, $\Delta K=0$, $\Delta F=0, \pm 1$, $\Delta I=0$. Chaque composante K du spectre de rotation possède donc sa propre structure hyperfine qui, à un facteur d'échelle près, est identique à celle d'une molécule linéaire.

Parmi les toupies symétriques interstellaires présentant une structure hyperfine quadrupolaire citons CH_3CN et bien sûr NH_3 . Il est à noter cependant que dans le cas de cette dernière molécule, les transitions radio observées appartiennent au spectre d'inversion, et non de rotation, de la molécule.

c. Cas des molécules asymétriques

Il est commode d'exprimer l'énergie de couplage quadrupolaire en fonction de l'énergie réduite $E(\kappa)$ et du paramètre d'asymétrie κ de la toupie asymétrique. Compte-tenu des expressions suivantes des valeurs moyennes des opérateurs P_g^2 :

$$\langle P_a^2 \rangle = 1/2 [J(J+1) + E(\kappa) - (\kappa+1)(\partial E/\partial \kappa)] \quad (I.50)$$

$$\langle P_b^2 \rangle = (\partial E/\partial \kappa) \quad (I.51)$$

$$\langle P_c^2 \rangle = 1/2 [J(J+1) - E(\kappa) + (\kappa+1)(\partial E/\partial \kappa)] \quad (I.52)$$

on peut exprimer l'énergie de couplage quadrupolaire d'une toupie symétrique sous la forme :

$$E_Q = \{ \chi_{aa} [J(J+1) + E(\kappa) - (\kappa-1)(\partial E/\partial \kappa)] + 2 \chi_{bb} (\partial E/\partial \kappa) + \chi_{cc} [J(J+1) - E(\kappa) + (\kappa-1)(\partial E/\partial \kappa)] \} Y(J,I,F) / J(J+1) \quad (I.53)$$

Les règles de sélection des transitions dipolaires électriques sur les valeurs de J , K_{-1} et K_1 ont été énoncées précédemment. S'y ajoutent les conditions $\Delta F=0, \pm 1$ et $\Delta I=0$.

Les toupies asymétriques ayant une structure quadrupolaire sont nombreuses. Cependant les molécules relativement abondantes, dont les spectres interstellaires présentent une structure quadrupolaire résolue, demeurent en nombre limité. Citons par exemple CH_3NH_2 .

2. Couplage quadrupolaire par deux noyaux

Quand une molécule présente deux noyaux, ou plus, responsables de couplage quadrupolaire, la structure hyperfine est en général très complexe : en effet, le couplage de chaque noyau perturbe le gradient de champ électrique moyen qui interagit avec les autres noyaux. Cependant lorsque le couplage n'est dû qu'à deux noyaux et que l'un (noté 1 ci-dessous) est responsable d'un couplage beaucoup plus fort que l'autre, l'énergie de couplage quadrupolaire prend une forme simple. Le spin du premier noyau, I_1 est couplé à J pour former la résultante F_1 , celle-ci, couplée au spin du second noyau, I_2 , forme la résultante F .

L'hamiltonien H_{Q2} , qui représente l'interaction de I_2 et de J peut être traité comme une perturbation de l'hamiltonien H_{Q1} d'interaction entre I_1 et J . Il est alors aisé de montrer (voir par exemple Gordy and Cook p. 275) que l'énergie de couplage quadrupolaire peut se mettre sous la forme :

$$E_Q = E_{Q1}(F_1) + \sum_{F_2} [C(F_1, F_2)]^2 E_{Q2}(F_2) \quad (I.54)$$

Les termes E_{Q1} et E_{Q2} sont donnés par les expressions déterminées dans le cas d'un couplage par un noyau unique et les coefficients $C(F_1, F_2)$ s'expriment en fonction des coefficients "6j" de la façon suivante :

$$C(F_1, F_2) = (-1)^{J+F_1+I_2} [(2F_1+1)(2F_2+1)]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} I_1 & J & F_1 \\ I_2 & F & F_2 \end{matrix} \right\} \quad (I.55)$$

3. Structure hyperfine magnétique

Comme nous l'avons indiqué précédemment, nos calculs de la structure hyperfine magnétique sont limités au cas des molécules linéaires dans un état autre que singulet Σ .

Au premier ordre de perturbation, l'hamiltonien d'interaction magnétique peut se mettre sous la forme (voir Townes et Schawlow, p. 194):

$$H_m^{(1)} = a \Lambda \mathbf{I} \cdot \mathbf{k} + b \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} + c (\mathbf{I} \cdot \mathbf{k}) (\mathbf{S} \cdot \mathbf{k}) \quad (I.56)$$

Le premier terme représente l'interaction du spin nucléaire I avec le moment électronique orbital L , de projection Λ sur l'axe \mathbf{k} de la molécule. Les deux autres termes correspondent à l'interaction entre le spin nucléaire I et le spin électronique S . L'énergie d'interaction prend différentes formes selon les types de couplages qui s'établissent entre les différents moments angulaires. La **Figure I.10** représente les couplages possibles dans le cas (a) et dans le cas (b) de Hund.

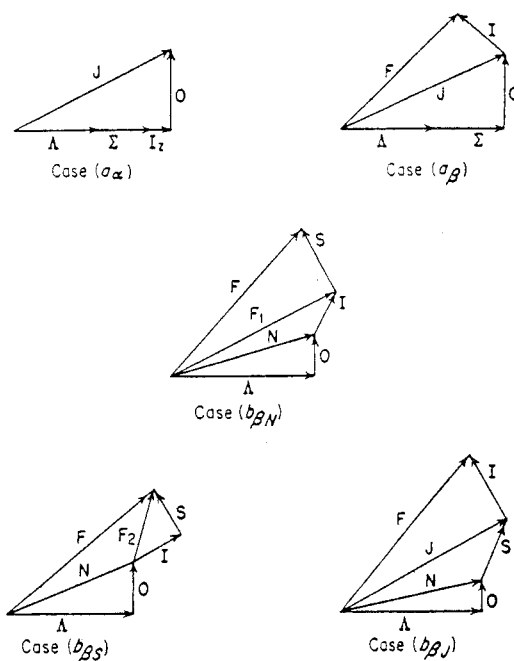


Figure 1.10 : Schémas de couplage des moments angulaires dans le cas (a) et dans le cas (b) de Hund (Townes et Schawlow, p. 197).

Nous donnons ci-dessous les expressions de l'énergie hyperfine magnétique dans les trois cas de couplage les plus fréquents.

Cas (a_α) :

$$W = [a\Lambda + (b+c)\Sigma] \Omega_I \quad (I.57)$$

où Ω_I est la projection du spin nucléaire I sur l'axe moléculaire k .

Cas (a_β) :

$$W = [a\Lambda + (b+c)\Sigma] \Omega \frac{I \cdot J}{J(J+1)} \quad (I.58)$$

avec

$$I \cdot J = 1/2 [F(F+1) - J(J+1) - I(I+1)] \quad (I.59)$$

Cas (b_{PJ}):

quand $S = 1/2$

$$\begin{aligned} W_{J=N+1/2} &= [2a\Lambda^2 / (N+1)(2N+1) + b / (2N+1) \\ &\quad + c (1 + 2\Lambda^2/(N+1)) / (2N+1)(2N+3)] \mathbf{I.J} \\ W_{J=N-1/2} &= [2a\Lambda^2 / N(2N+1) - b / (2N+1) \\ &\quad + c (1 - 2\Lambda^2/N) / (2N-1)(2N+1)] \mathbf{I.J} \end{aligned} \quad (\text{I.60})$$

quand $S = 1$

$$\begin{aligned} W_{J=N+1} &= [a\Lambda^2 / (N+1)^2 + b / (N+1) \\ &\quad + c (1 + 2\Lambda^2/(N+1)) / (N+1)(2N+3)] \mathbf{I.J} \\ W_{J=N} &= [a\Lambda^2 (N^2+N-1) / N^2(N+1)^2 + b / N(N+1) \\ &\quad + c (1 - 2\Lambda^2/N(N+1)) / N(N+1)] \mathbf{I.J} \\ W_{J=N-1} &= [a\Lambda^2 / N^2 - b / N \\ &\quad + c (1 - 2\Lambda^2/N) / N(2N-1)] \mathbf{I.J} \end{aligned} \quad (\text{I.61})$$

où $\mathbf{I.J}$ est donné par la relation (I.59).

Les règles de sélection sont les mêmes que pour la structure hyperfine quadrupolaire : $\Delta J = \pm 1$, $\Delta F = 0, \pm 1$ et $\Delta I = 0$. Les constantes de couplage a , b , c sont typiquement de l'ordre de quelques dizaines à quelques centaines de MHz si bien que les composantes hyperfines magnétiques sont aisément résolues (voir par exemple la **Figure II.3**, qui montre les composantes hyperfines $N=1-0$ de CCH, observées dans IRC+10216).

E. Tableau récapitulatif

Tous les termes intervenant dans l'expression des hamiltoniens utilisés par notre programme de calcul des fréquences des raies de rotation ont été explicités dans les pages précédentes. Les différentes constantes moléculaires qu'ils font intervenir sont récapitulées dans le tableau ci-dessous. Dans la grande majorité des cas, elles sont déterminées expérimentalement à partir de l'observation, le plus souvent au laboratoire, quelquefois dans l'espace interstellaire, des transitions rotationnelles (en ondes millimétriques) ou vibro-rotationnelles (en ondes sub-millimétriques). Dans quelques cas, les constantes moléculaires n'étaient pas disponibles dans la littérature (espèces non observées ou isotopes rares) et nous avons été amenés à déterminer *par le calcul* les constantes rotationnelles des molécules. Les méthodes que nous avons utilisées sont décrites brièvement dans le prochain paragraphe.

TABLEAU RECAPITULATIF

Molécule	Rotation	Distorsion	St. Fine	St. Hyperfine
Linéaire $^1\Sigma$	B	D, H, L,...		I, χ
$^2\Sigma$	B	D, H, L,...	γ	a, b, c
$^3\Sigma$	B	D, λ_1 ,...	γ, λ	a, b, c
$^2\Pi$	B	D	A, q_L , p, q	a, b, c
Symétrique	A, B (C, B)	D_J, D_{JK}, D_K ,...		I, χ
Asymétrique	A, B, C	$\Delta_J, \Delta_{JK}, \Delta_K$, δ_J, δ_K ,...		I, χ_{aa}, χ_{bb} , χ_{cc} ,

III. QUELQUES METHODES DE DETERMINATION DES CONSTANTES

Dans la plupart des cas, les constantes moléculaires que nous avons introduites comme données du programme pour calculer les fréquences des transitions ont été déterminées à partir de fréquences de transitions observées. Les principales limites au nombre et à la précision des constantes moléculaires que l'on peut ainsi déduire, sont le nombre de transitions observées, la précision des mesures de fréquences et l'exactitude des assignations des raies. Ce dernier point peut paraître surprenant, mais, compte-tenu de l'extrême richesse des spectres moléculaires observés au laboratoire, en particulier dans le domaine submillimétrique, il n'est pas rare que la précision sur certaines constantes moléculaires soit améliorée de façon significative par une nouvelle assignation des transitions, qui conduit à un bien meilleur ajustement des expressions théoriques des fréquences aux valeurs mesurées.

Ainsi que nous l'avons mentionné plus haut, dans quelques cas (en particulier ceux de la plupart des nouvelles molécules que nous avons détectées, voir le chapitre suivant), il nous a fallu déterminer nous-mêmes les constantes moléculaires indispensables au calcul des fréquences de rotation.

Seules les constantes rotationnelles (qui sont directement liées à la géométrie de la molécule) peuvent être assez aisément et précisément déduites, par le calcul, de la connaissance de la structure de la molécule, de substitués isotopiques ou de molécules analogues. Les autres constantes ont été supposées identiques à celles de molécules analogues (c'est le cas des constantes de distorsion centrifuge, par exemple) ou ont été négligées pour le calcul des fréquences de transition.

La principale source de difficultés dans la détermination des constantes rotationnelles provient de ce que les longueurs de liaison des molécules sont affectées par leur énergie de vibration, même dans l'état vibrationnel fondamental; diverses procédures tentent de corriger ces effets à des degrés divers, elles conduisent à distinguer plusieurs définitions des longueurs de liaison et donc des constantes rotationnelles qui s'en déduisent :

- r_v, A_v, B_v, C_v : longueur de liaison et constantes rotationnelles effectives de l'état vibrationnel v .

- r_0, A_0, B_0, C_0 : longueur de liaison et constantes rotationnelles effectives de l'état vibrationnel fondamental.

- r_e , A_e , B_e , C_e : longueur de liaison et constantes rotationnelles d'équilibre, d'un hypothétique état, libre de tout effet de vibration; ces grandeurs sont évaluées en corrigeant des effets de vibration les longueurs de liaisons et les constantes rotationnelles effectives. Au premier ordre de correction, on peut écrire :

$$A_e = A_v + \sum_s \alpha_{sa} (v_s + d_s/2) \quad (I.62)$$

où l'indice s repère les modes de vibration de l'état v , de nombres quantiques v_s et de dégénérescences d_s .

Nous explicitons ci-dessous deux méthodes, que nous avons utilisées pour déterminer les constantes rotationnelles de molécules que nous cherchions à détecter dans l'espace interstellaire.

A. Calcul direct des moments d'inertie

La méthode, a priori la plus évidente, de détermination des constantes rotationnelles est celle du calcul direct des moments principaux d'inertie à partir des angles et des longueurs de liaison de la molécule. Les calculs peuvent éventuellement être fastidieux si la molécule est complexe (on peut trouver, par exemple dans Gordy and Cook, pages 502 et 503, les expressions des moments principaux d'inertie de molécules simples à 2, 3, 4 et 5 atomes), mais ce n'est pas là le principal inconvénient de la méthode. Les valeurs des angles et des longueurs de liaisons doivent faire l'objet d'hypothèses : de la connaissance de la géométrie d'autres molécules (elle-même déduite d'études spectroscopiques) on tire des valeurs "standards" des longueurs de liaison d'équilibre (qui dépendent du type de la liaison et des atomes mis en jeu⁽¹⁾); Ces valeurs sont elles-mêmes entachées d'incertitudes dues aux effets de l'énergie résiduelle de vibration mentionnés plus haut, si bien que les constantes rotationnelles que l'on déduit ainsi sont généralement peu précises. Nous avons cependant appliqué cette méthode, avec succès, au calcul de la constante rotationnelle de la molécule

(1) On trouvera par exemple dans Gordy and Cook page 669 des valeurs de longueurs de liaison covalente pour différents éléments ainsi qu'une formule empirique permettant d'en déduire les longueurs de liaisons entre atomes différents.

C_5H (voir le chapitre 2), qui possède une géométrie particulièrement simple (linéaire) et qui fait partie d'une famille de molécules aux constantes bien connues (CCH , C_3H , C_4H).

B. Substitution isotopique

Dans le système de coordonnées des axes principaux d'une molécule, les éléments du tenseur d'inertie I s'écrivent:

$$I_{xx} = \sum_i m_i (y_i^2 + z_i^2) \equiv I_x \quad (I.63)$$

$$I_{yy} = \sum_i m_i (x_i^2 + z_i^2) \equiv I_y \quad (I.64)$$

$$I_{zz} = \sum_i m_i (x_i^2 + y_i^2) \equiv I_z \quad (I.65)$$

$$I_{xy} = - \sum_i m_i x_i y_i = 0 \quad (I.66)$$

$$I_{xz} = - \sum_i m_i x_i z_i = 0 \quad (I.67)$$

$$I_{yz} = - \sum_i m_i y_i z_i = 0 \quad (I.68)$$

Lors d'une substitution isotopique d'un atome de cette molécule, dont la masse passe de m à $m + \Delta m$, la masse M de la molécule devient $M + \Delta m$, les longueurs et les angles de liaison demeurent inchangés mais les axes principaux d'inertie peuvent se translater et tourner. Soit μ la masse réduite de la substitution, définie par:

$$\mu = M \Delta m / (M + \Delta m) \quad (I.69)$$

Dans le système des axes principaux de la molécule mère, où les coordonnées de l'atome substitué sont x , y , et z , les moments d'inertie de la molécule substituée s'écrivent :

$$I'_{xx} = I_x + \mu (y^2 + z^2) \quad (I.70)$$

$$I'_{yy} = I_y + \mu (x^2 + z^2) \quad (I.71)$$

$$I'_{zz} = I_z + \mu (x^2 + y^2) \quad (I.72)$$

$$I'_{xy} = -\mu xy \quad (I.73)$$

$$I'_{xz} = -\mu xz \quad (I.74)$$

$$I'_{yz} = -\mu yz \quad (I.75)$$

* Dans le cas d'une molécule linéaire, ou d'une molécule symétrique substituée sur l'axe de symétrie, la substitution ne modifie pas l'orientation des axes principaux d'inertie. Les moments d'inertie principaux de la molécule substituée (supposée d'axe z) sont directement donnés par les relations:

$$I'_x = I_x + \mu x^2 \quad (I.76)$$

$$I'_y = I_y + \mu y^2 \quad (I.77)$$

$$I'_z = I_z \quad (I.78)$$

* Dans le cas d'une molécule symétrique substituée hors de l'axe, la molécule substituée est une toupie asymétrique. En choisissant les axes x et y de façon que l'atome substitué soit dans le plan yz, l'axe x demeure axe principal d'inertie et :

$$I'_x = I_x + \mu (y^2 + z^2) \quad (I.79)$$

En revanche les moments principaux d'inertie I'_y et I'_z doivent être calculés en diagonalisant le tenseur d'inertie. On obtient :

$$I'_y = \frac{1}{2} \{ [I_y + I_z + \mu (y^2 + z^2)] + [(I_y - I_z)^2 + 2\mu (I_y - I_z)(z^2 - y^2) + \mu^2 (y^2 + z^2)^2]^{1/2} \} \quad (I.80)$$

$$I'_z = \frac{1}{2} \{ [I_y + I_z + \mu (y^2 + z^2)] - [(I_y - I_z)^2 + 2\mu (I_y - I_z)(z^2 - y^2) + \mu^2 (y^2 + z^2)^2]^{1/2} \} \quad (I.81)$$

* Dans le cas d'une molécule asymétrique plane, on obtient les mêmes expressions que ci-dessus, en choisissant l'axe x perpendiculaire au plan de la molécule.

* *Dans le cas d'une molécule asymétrique quelconque*, il faut diagonaliser la matrice (3x3) qui représente le tenseur d'inertie de la molécule substituée dans le système des axes principaux de la molécule mère.

Les relations ci-dessus ne s'appliquent strictement qu'aux moments d'inertie calculés à partir des longueurs et des angles de liaison d'équilibre. Les énergies résiduelles de vibration ont comme effet que les longueurs de liaison des différents substitués d'une même molécule ne sont pas identiques. Une des manifestations spectaculaires de cet effet est le défaut d'inertie des molécules planes : dans la configuration d'équilibre, où (c) est l'axe perpendiculaire au plan de la molécule, on a

$$I_c^e - I_a^e - I_b^e = 0 \quad (\text{I.82})$$

alors que les moments d'inertie effectifs satisfont à

$$I_c^o - I_a^o - I_b^o = \Delta \quad (\text{I.83})$$

où Δ est le défaut d'inertie de la molécule.

Différentes méthodes peuvent être appliquées pour corriger les constantes rotationnelles des substitués isotopiques des effets d'énergie résiduelle de vibration. La difficulté réside bien sûr dans l'estimation des paramètres de vibration-rotation, α_s^i ($i=a,b,c$), qui ne sont pas identiques pour tous les substitués isotopiques. Nous ne détaillerons pas plus ici cette question; un exemple de correction des constantes rotationnelles sera donné dans le chapitre suivant, dans l'article relatant la détection des isotopes $^{29}\text{SiC}_2$ et $^{30}\text{SiC}_2$ dans l'enveloppe de l'étoile carbonée IRC+10216.

Chapitre 2

Recherche et détection de nouvelles molécules

I. POURQUOI CHERCHER DE NOUVELLES MOLECULES ?

Les motivations qui président à la recherche de nouvelles molécules interstellaires sont nombreuses et diverses. Le spectroscopiste sera plus attiré par les espèces "exotiques", difficilement observables au laboratoire mais qui permettent, par exemple, de tester les calculs de structure moléculaire *ab initio* ou de trancher entre deux états fondamentaux possibles. Nous verrons, dans la suite de ce chapitre, que le milieu interstellaire en général, et plus particulièrement une enveloppe circumstellaire, IRC+10216, constituent une mine très riche de radicaux libres, trop réactifs pour être facilement observés au laboratoire, et qui soulèvent des problèmes de spectroscopie intéressants, comme par exemple les chaînes carbonées, C_nH ($n=1,2,\dots,6$), sur lesquelles nous reviendrons plus longuement. Le chimiste, lui, recherchera les espèces "clés" des modèles de chimie, celles qui expliquent les mécanismes de formation ou les abondances de toute une famille de molécules. Signalons, par exemple, un des problèmes importants de la chimie interstellaire, que sont les mécanismes de formation des molécules complexes. La première famille de chaînes carbonées détectées dans l'espace interstellaire est celle des cyanopolyynes HC_nN ($n=1,2,\dots,11$). Depuis, comme nous le verrons par la suite, la découverte d'un nombre croissant de radicaux de la famille C_nH évoquée plus haut, puis de molécules soufrées C_nS ($n=1,2,3$), a mis en évidence que la formation de telles chaînes est probablement un mécanisme très répandu et l'étude, en particulier, des abondances relatives des divers membres d'une famille et sa comparaison avec les prédictions des modèles théoriques de formation des molécules, devrait permettre de mieux comprendre cet aspect important de la chimie interstellaire. Signalons également le problème de la condensation de certains éléments sur les grains de poussière, qui rend particulièrement intéressante la détection en phase gazeuse de molécules contenant ces éléments. Le milieu interstellaire est également caractérisé par une grande variété de conditions physiques qui définissent des chimies assez différentes (photochimie, chimie sur les grains, chimie des chocs,...) et le test essentiel des divers mécanismes de formation et de destruction des espèces qu'elles mettent en jeu est fourni par l'observation des molécules interstellaires. D'autres ne verront dans les molécules interstellaires que des outils de mesure de la température et de la densité du gaz (nous verrons au cours de ce chapitre quelles informations on peut espérer déduire de l'observation

des transitions moléculaires). Ils seront alors particulièrement friands par exemple de molécules dans des états excités ou présentant un très grand nombre de transitions. La détermination des rapports d'abondance isotopique peut, elle, motiver les spécialistes de nucléosynthèse ou de cosmologie. Ces différents point de vue apparaîtront tous plus ou moins dans les présentations des découvertes de nouvelles molécules qui font l'objet de ce chapitre. La dernière motivation est au coeur de la deuxième partie de ce travail, consacrée à la mesure des rapports isotopiques dans les enveloppes circumstellaires.

II. OU CHERCHER DE NOUVELLES MOLECULES ?

Le choix de la source moléculaire est un facteur important du succès d'une recherche de nouvelles molécules. En effet les conditions physiques variées du milieu interstellaire (température, densité, champs de rayonnement UV et IR) influent sur les efficacités des processus chimiques possibles et donc sur les **abondances moléculaires**. En outre, l'intensité d'une transition moléculaire donnée dépend également de ses **conditions d'excitation**, c'est à dire des paramètres physiques (température, densité, champ de rayonnement) du milieu émetteur.

On distingue généralement quatre catégories principales de nuages moléculaires. Dans chacune des catégories, un ou deux objets, particulièrement proches ou présentant un caractère extrême, donnent lieu à des spectres moléculaires intenses, et constituent des sources privilégiées de recherche de molécules.

- **Les nuages diffus** et peu opaques, très perméables aux champs de rayonnement, représentent un milieu peu dense, relativement chaud et ionisé, où les espèces moléculaires sont rapidement photodissociées. Nous n'en parlerons pas plus longuement, car ils intéressent assez peu la recherche de molécules un tant soit peu complexes (à l'exception notable, toutefois, des hydrocarbures aromatiques polycycliques ("PAH"), qui sont de très grosses molécules carbonées, qui comportent plusieurs dizaines à plusieurs centaines d'atomes, et dont la formation n'est probablement pas sans relation avec celles des grains de poussière carbonés).

- **Les nuages sombres**, denses et froids, ne contiennent que des étoiles de faible masse. Le prototype des nuages sombres est le nuage Heiles' Cloud2 (HCl2) du complexe du Taureau. C'est le nuage sombre le plus proche du système solaire. De très nombreuses molécules ont été observées et même, pour certaines, découvertes pour la première fois dans la condensation baptisée TMC1 de ce nuage. Citons en particulier les cyanopolyynes HC_nN ($n=3,5,\dots,9$) (Kroto *et al*, 1978; Broten *et al*, 1978), les chaînes carbonées C_nH ($n=2,3,\dots,6$) (Thaddeus *et al*, 1985a, Suzuki *et al*, 1986, Cernicharo *et al*, 1987a) et C_nS ($n=2,3$) (Saito *et al*, 1987, Yamamoto *et al*, 1987). En outre, l'étroitesse des raies émises par cette source permet l'observation des structures fine et/ou hyperfine des raies, ce qui fournit de précieux indices pour l'identification de nouvelles molécules. Cependant, à ce jour, peu de recherches systématiques de nouvelles molécules dans des gammes de fréquences étendues ont été menées dans cette source car l'étroitesse et la faiblesse des raies moléculaires exige des

récepteurs de grande résolution spectrale et des temps d'intégration encore prohibitifs avec les détecteurs actuels. A notre connaissance, la seule couverture spectrale publiée à ce jour est celle de Kaifu *et al.* (1987), réalisée dans les gammes 22-24 GHz et 36-50 GHz avec l'antenne de 45m de diamètre de Nobeyama, au Japon, et qui a d'ailleurs permis l'identification de C_2S et de C_3S .

- **les nuages moléculaires géants**, sont les lieux de formation des étoiles massives. Les processus, parfois violents, qui accompagnent la naissance et/ou la mort des étoiles massives, peuvent donner lieu à un important chauffage du gaz moléculaire et à des chocs qui contribuent à la spécificité des mécanismes chimiques et des conditions d'excitation au voisinage des sites de formation d'étoiles massives.

Deux nuages moléculaires se partagent le quasi-monopole de la découverte des molécules interstellaires. Ce sont OrionA et SgrB2, deux régions de formation d'étoiles très actives, l'une dans la région d'Orion, l'autre située à proximité du centre galactique. L'un et l'autre objets ont donné lieu à des observations systématiques de larges bandes de fréquences. Parmi les plus récentes, citons les observations d'Orion A effectuées avec le télescope de 20m de diamètre d'Onsala, en Suède, par Johansson *et al.* (1985), entre 72.2 et 91.1 GHz. Cette même source a été observée à plus haute fréquence avec le télescope de 10m d'Owens Valley, aux Etats-Unis, entre 215 et 247 GHz par Sutton *et al.* (1985) puis entre 247 et 263 GHz par Blake *et al.* (1986). De 1977 à 1982, le radiotélescope de 7m de diamètre des AT & T Bell Laboratories a permis de nombreuses observations de SgrB2, qui ont été rassemblées par Cummins *et al.* (1986) sous la forme d'une couverture spectrale s'étendant de 70 à 150 GHz.

Nous avons réalisé avec l'antenne de l'IRAM au Pico Veleta, quelques observations de la source SgrB2, qui nous ont permis de détecter trois nouvelles molécules; la source OrionA a fait l'objet d'observations systématiques, qui constituent une "mini" couverture spectrale, présentée de façon un peu plus détaillée ci-dessous.

- **les enveloppes circumstellaires** (que nous aurons l'occasion de décrire de façon beaucoup plus détaillée dans le chapitre 3) sont constituées par le gaz éjecté de l'étoile par le vent stellaire. Celui-ci est très puissant lors des phases ultimes de la vie des étoiles, en particulier lors de la phase AGB des géantes rouges, et un important nuage de gaz, en expansion, généralement à symétrie sphérique, se forme autour de l'étoile. Le mouvement systématique d'éjection du gaz limite considérablement les temps d'interaction des atomes et

des molécules dans l'enveloppe, et définit une chimie circumstellaire essentiellement hors d'équilibre. La composition chimique des régions externes de l'enveloppe est probablement dominée par des mécanismes photochimiques (dûs à la pénétration du champ de rayonnement interstellaire). En outre les abondances élémentaires, et donc moléculaires, dans l'enveloppe circumstellaire sont conditionnées par le type de l'étoile centrale. C'est en particulier le cas du rapport d'abondance C/O, qui permet de classer les géantes rouges en types M, S et C et des rapports isotopiques, qui comme nous le verrons ultérieurement, sont fortement liés aux processus thermonucléaires qui se déroulent au cœur de l'étoile. En outre, les enveloppes des étoiles carbonées sont caractérisées par une chimie beaucoup plus riche que la chimie de l'oxygène qui se manifeste dans les enveloppes des étoiles M. L'enveloppe circumstellaire la plus étudiée est l'enveloppe d'une étoile carbonée, IRC+10216. Elle présente le double avantage d'être proche (100 - 200 pc, Zuckerman et Dyck, 1986a; Jura et Kleinman, 1989) et d'être alimentée par une forte perte de masse stellaire, si bien que les raies moléculaires de l'enveloppe sont intenses et larges. C'est une source moléculaire très riche en chaînes carbonées "exotiques" comme HC_nN , C_nH , C_nS (voir l'Annexe A), dont la formation est probablement initiée par des ions tels C^+ et C_2H_2^+ , produits par photodissociation des molécules dans les régions externes (Glassgold *et al*, 1986, 1987; Mamon *et al* 1987; Nejad et Millar, 1988). Cette enveloppe circumstellaire est également une source de molécules silicées (voir l'Annexe A et les articles de ce chapitre), elle est en particulier un des très rares sites où l'on observe la deuxième molécule cyclique découverte dans l'espace interstellaire, SiCC. En outre, le mouvement d'expansion du gaz est responsable de la forme caractéristique des raies, à flancs très abrupts, qui rend plus aisée la découverte des raies faibles. Cette source a été observée par Johansson *et al.* (1985) avec l'antenne d'Onsala, entre 72 et 91 GHz. La couverture spectrale que nous avons réalisée avec l'antenne de 30m de l'IRAM, au Pico Veleta, est présentée dans le paragraphe suivant et, à l'exception de CH_3NC et des isotopes de C_3H_2 , toutes les détections de nouvelles molécules que nous avons effectuées et que nous présentons dans ce chapitre, l'ont été dans cette enveloppe.

III. LES COUVERTURES SPECTRALES D'ORION ET D'IRC+10216

A. Observations d' IRC+10216

Le point de départ et la motivation principale de ce travail ont été fournis par la recherche de nouvelles molécules: elle nous a conduit à observer un grand nombre de spectres, que nous avons ensuite rassemblés et dont nous avons cherché à exploiter toute la richesse. Ce travail est en cours d'achèvement et la totalité des spectres, ainsi que l'analyse des transitions moléculaires observées, seront prochainement publiées (Cernicharo, Kahane et Guélin, en préparation). Nous nous contenterons ici de faire un rapide bilan de cette couverture spectrale, de décrire les méthodes de dépouillement et de calibration des spectres employées et d'exposer le principe et les résultats de la détermination des températures rotationnelles et des densités projetées des molécules observées.

1. Présentation de la couverture spectrale

La totalité des spectres a été observée avec l'antenne de 30m de diamètre de l'IRAM, au Pico Veleta. Les observations ont été effectuées entre l'automne 1985 et le printemps 1988 par José Cernicharo et moi-même, de l'Observatoire de Grenoble, Michel Guélin de l'IRAM et Jesus Gomez-Gonzales de l'Observatoire de Yebes. Soulignons que ce travail n'aurait pu être mené à bien sans l'active participation des ingénieurs de l'IRAM, en particulier H. Hein et S. Navarro, qui ont eu la charge d'optimiser le réglage des récepteurs, lors des nombreux changements de fréquence que ces observations ont nécessité.

Les observations couvrent 83 GHz répartis en 2 gammes :

- la gamme dite "3mm", qui s'étend de 80 GHz à 116 GHz, a été observée tout d'abord avec un récepteur Schottky, puis dès qu'il a été mis en fonctionnement, avec un récepteur SIS, beaucoup moins bruyant. La quasi totalité des spectres à 3mm a été observée en mode "double bande", c'est-à-dire que les fréquences signal et image, dont la différence est le double de la fréquence intermédiaire (~ 3.9 GHz), sont détectées simultanément, si bien que des raies appartenant à l'une et l'autre bande figurent dans le spectre. Nous décrivons un peu plus loin la méthode employée pour dépouiller de tels spectres. La couverture spectrale à

3mm est constituée par la somme de 215 spectres individuels; le bruit quadratique moyen, sur l'ensemble des 36 GHz qu'elle couvre est de 0.01 K (exprimé en température d'antenne T_A^*); les spectres les plus bruyants correspondent à un bruit double, et certains spectres présentent un bruit jusqu'à cinq fois plus faible. Le temps total d'intégration de la couverture spectrale à 3mm est d'environ 100h.

- la gamme dite "2mm", qui s'étend de 129 à 176 GHz, a été observée un peu plus récemment, avec un récepteur de type SIS. La plupart des spectres ont été observés en mode simple bande, c'est à dire que le récepteur a été réglé de façon à ce que le gain à la fréquence de la bande signal soit très supérieur à celui de la bande image (typiquement, la réjection de la bande image est de 15 db). 175 spectres individuels ont été réunis pour former cette bande spectrale. Le bruit moyen et sa dispersion sont tout à fait similaires à ceux de la bande à 3mm et le temps d'intégration total est également de l'ordre de 100h, bien que la couverture spectrale soit plus étendue et que la plupart des spectres aient été observés en mode simple bande, grâce aux meilleures performances des récepteurs de type SIS.

Dans l'un et l'autre cas, les observations ont été réalisées en utilisant une procédure dite de permutation de position, où l'on observe successivement la source et un champ de comparaison (situé à 5 minutes d'arc en ascension droite de la source) afin d'éliminer par soustraction les émissions atmosphérique et instrumentale. Dans les deux cas également, nous avons utilisé comme récepteur spectral une banque de 512 canaux de 1 MHz de large. Cette résolution permet une bonne définition des profils de raies (en raison de la vitesse d'expansion de l'enveloppe, les raies émises ont une largeur de 29 km/s ce qui correspond à 10 canaux à la fréquence de 100 GHz), tout en assurant une couverture spectrale suffisamment large (500 MHz), la recherche de nouvelles molécules nécessitant parfois l'observation de larges bandes de fréquences. Nous renvoyons à l'article de Baars *et al* (1987), pour une description plus complète des caractéristiques du télescope.

Nous avons ainsi détecté environ 400 raies, dont plus de la moitié n'avaient jamais été observées dans l'espace interstellaire; leurs intensités (exprimées en température d'antenne) vont de 20 K, pour la raie ($J=2-1$) de CO (qui correspond, elle, à une longueur d'onde de l'ordre de 1mm), à quelques cK pour les plus faibles des raies identifiées comme telles. Quelques 200 raies appartiennent à une vingtaine de molécules déjà détectées et identifiées dans l'espace interstellaire et à leurs substitués isotopiques (voir l' Annexe A et Kahane *et al*, 1988a). Environ 130 raies ont pu être attribuées à de nouvelles espèces que nous avons identifiées (voir les articles de ce chapitre et Cernicharo et Guélin, 1987) ou à des molécules

déjà connues mais se présentant dans des états vibrationnels excités encore jamais observés (voir l' Annexe A et Guélin *et al*, 1987; Yamamoto *et al*, 1987). Quelques 80 raies demeurent non identifiées, dont la très grande majorité présente des intensités très faibles. Dans certains cas, la densité de raies faibles dans le spectre est si grande, qu'il devient difficile de situer le niveau de la ligne de base (voir la **Figure II.1** qui présente deux exemples, heureusement non typiques, de spectres particulièrement riches en raies) et l'augmentation du temps d'intégration ne permettrait pas d'obtenir une meilleure détection des nombreuses raies faibles qui se pressent et même se chevauchent dans le spectre.

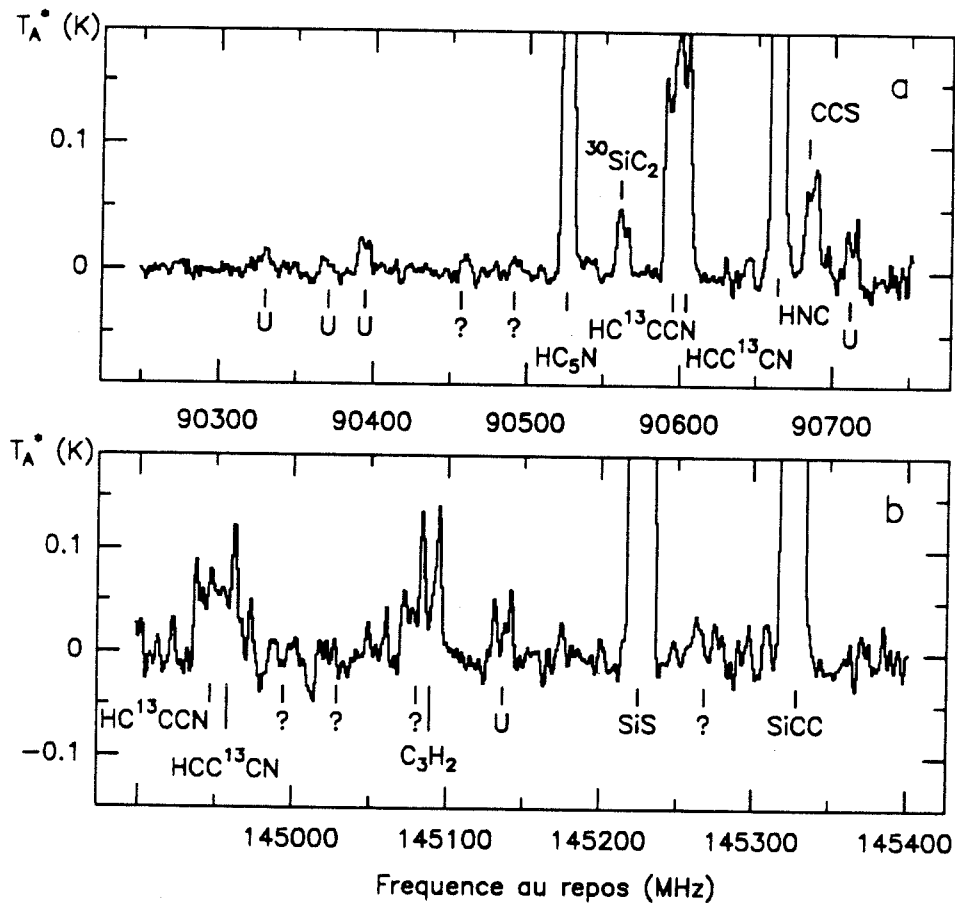


Figure II.1 : Deux exemples de spectres très riches, à 3mm (a), et à 2mm (b), observés dans l'enveloppe circumstellaire IRC+10216, avec le télescope de 30m de l'IRAM. Dans les deux cas, la limite de confusion semble atteinte : la densité des raies est telle qu'il devient difficile de situer le niveau de la ligne de base. Les raies "U" sont non identifiées; celle signalées par "?" sont douteuses.

2. Dépouillement et calibration des spectres

Afin de faciliter leur lecture, nous avons décidé de présenter les spectres observés en mode double bande, sous la forme de deux spectres, correspondant respectivement à la fréquence signal et à la fréquence image, "nettoyés" des raies appartenant à l'autre bande. La première étape consiste bien sûr à identifier les raies de l'une et l'autre bande. En cas de doute (ou d'ignorance, pour les raies inconnues), nous avons effectué une ou plusieurs observations à des fréquences légèrement différentes; en effet les raies de la bande signal et de la bande image se déplacent alors en sens inverses dans le spectre et il est aisé de déterminer leur appartenance. Après avoir fait passer une ligne de base (de degré 2 dans la très grande majorité des cas) dans le spectre double bande original, nous avons ajusté aux raies observées des profils théoriques, qui sont simplement des paraboles à courbure positive, négative ou nulle, tronquées à une largeur à la base de 29 km/s et convoluées à une fonction porte d'une largeur de 1MHz, qui représente la résolution spectrale instrumentale. Deux types de profils sont représentés dans la **Figure II.2**, superposés à des raies effectivement observées (la forme des raies est, comme nous le verrons dans le chapitre 3, définie par l'opacité des transitions et la taille relative de la source par rapport au lobe de l'antenne).

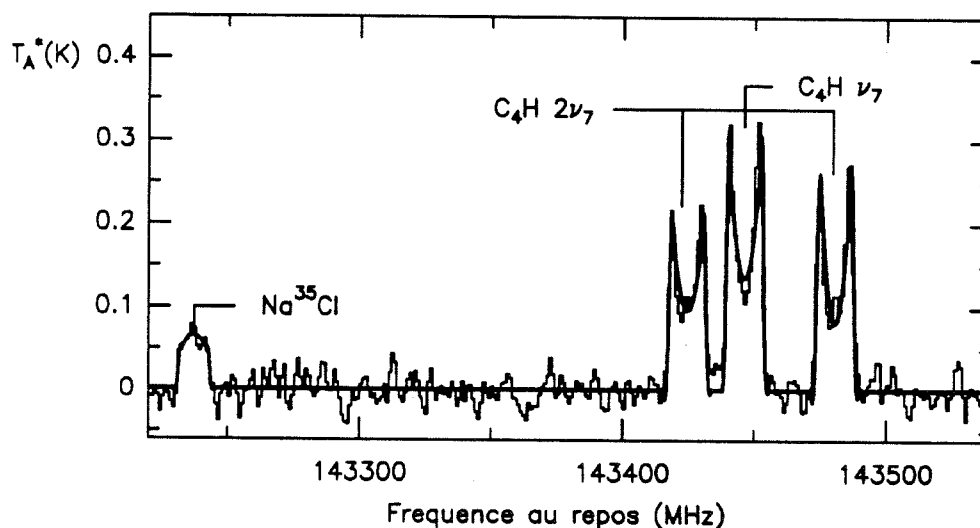


Figure II.2 : Un exemple d'ajustement de profils modèles à des raies observées dans IRC+10216. Les profils "en U" des raies de C_4H indiquent une émission optiquement mince et une source moléculaire résolue par le lobe de l'antenne (largeur à mi-puissance $\sim 16''$). En revanche la raie de NaCl présente un profil plutôt plat, caractéristique d'une source non résolue.

Afin d'obtenir un spectre "simple bande", nous soustrayons au spectre observé les profils modèles ajustés sur les raies de l'autre bande. Après avoir éventuellement sommé les différents spectres "simple bande" couvrant la même gamme de fréquences (dont les intensités se sont avérées être semblables à 10% près), nous avons transformé l'échelle d'intensité des spectres, initialement exprimée en température d'antenne effective hors atmosphère, T_A^* , en échelle de température de brillance dans le lobe principal, T_{mb} ; les deux échelles sont liées par la relation $T_A^* = \eta T_{mb}$ où η représente l'efficacité du lobe principal (pour l'antenne de 30m de diamètre de l'IRAM, à 2 et 3 mm, η vaut 0.6).

Les différentes étapes de ce traitement sont représentées dans la **Figure II.3**.

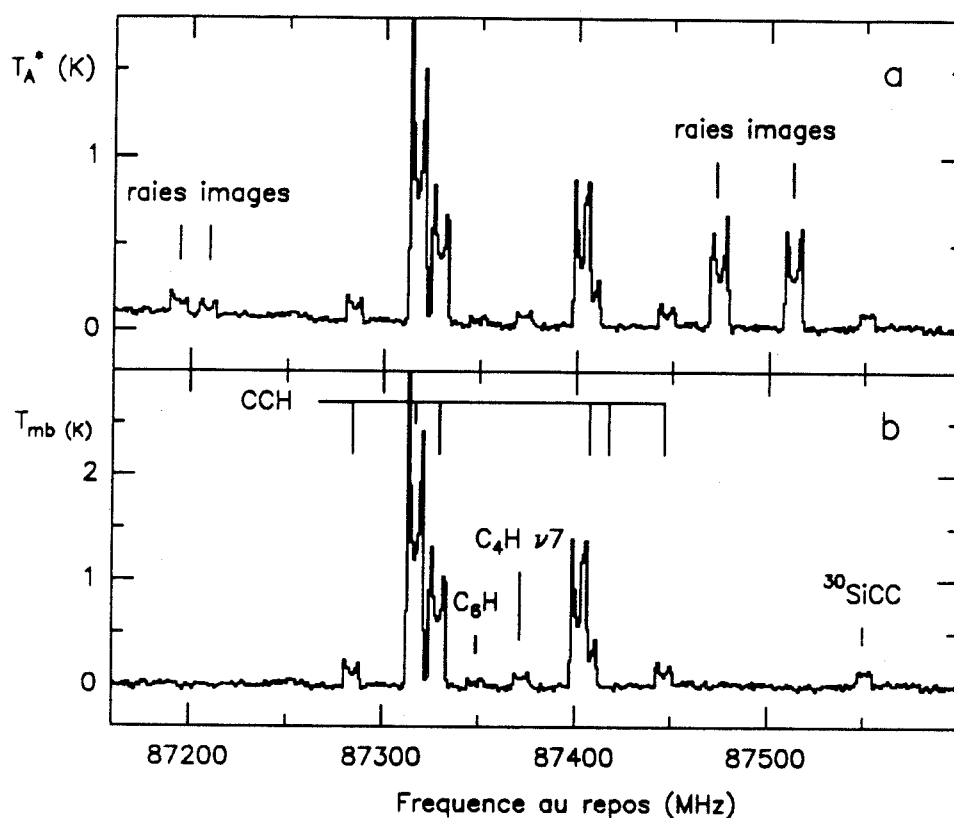


Figure II.3 : En (a), un spectre avant toute réduction. En (b), le spectre définitif, après soustraction d'une ligne de base de degré 2, soustraction des profils modèles ajustés sur les raies de la bande image et transformation de l'échelle de température d'antenne, T_A^* , en échelle de température de brillance dans le lobe principal, T_{mb} .

3. Température de rotation et densité projetée des molécules

La méthode de détermination de la température de rotation des transitions moléculaires et de la densité projetée des molécules à partir de l'intensité intégrée des raies observées que nous utilisons, suppose que les raies sont optiquement minces, que la source est homogène et que le rayonnement de fond continu est négligeable.

L'intensité de la raie à la fréquence ν est donnée par :

$$I_\nu = [1 - \exp(-\tau_\nu)] [B_\nu(T_{\text{ex}}) - B_\nu(T_{\text{bg}})] \quad (\text{II.1})$$

avec

$$B_\nu(T) = (2h\nu^3/c^2) [\exp(h\nu/kT) - 1]^{-1} \quad (\text{II.2})$$

où T_{ex} est la température d'excitation de la raie et T_{bg} la température du fond continu à la fréquence ν , soit, pour une raie optiquement mince et en négligeant le rayonnement de fond continu,

$$I_\nu = \tau_\nu B_\nu(T_{\text{ex}}) \quad (\text{II.3})$$

L'épaisseur optique dans la transition rotationnelle ($J \rightarrow J-1$) d'un milieu de température d'excitation T_{ex} homogène se met sous la forme :

$$\tau_\nu = (8 \pi^3 \nu / 3 h c) \mu^2 (S/g_J) N_u [\exp(h\nu/kT_{\text{ex}}) - 1] \phi_{\text{ul}}(\nu) \quad (\text{II.4})$$

où N_u est la densité projetée de molécules dans le niveau supérieur de la transition rotationnelle ($J \rightarrow J-1$), μ le moment dipolaire de la molécule, S la force de raie, g_J la dégénérescence du niveau J et $\phi_{\text{ul}}(\nu)$ le profil normalisé de la raie. (Pour une molécule linéaire, la force de raie de la transition $J \rightarrow J-1$ est simplement J ; pour une toupie asymétrique, sa valeur, dont le calcul fait intervenir les éléments de matrice du dipôle électrique, est calculé par notre programme).

La température de brillance T_B étant définie par

$$I_\nu = (2k\nu^2/c^2) T_B \quad (\text{II.5})$$

la température de brillance intégrée en vitesse, W , s'exprime alors sous la forme :

$$W = \int T_B dv = (8 \pi^3 v / 3 k) \mu^2 (S/g_J) N_u \quad (\text{II.6})$$

Si les niveaux rotationnels de la molécule sont à l'équilibre à la température de rotation T_{rot} , la densité projetée du niveau supérieur de la transition considérée, N_u , s'exprime en fonction de la densité projetée totale de la molécule, N , par

$$N_u = [g_J / Z] N \exp(-E_u / kT_{\text{rot}}) \quad (\text{II.7})$$

où Z est la fonction de partition de la molécule et E_u l'énergie du niveau supérieur de la transition. Par conséquent, si cet équilibre est réalisé, la courbe $\log(N_u / 2J+1) [= \log(1.67 \cdot 10^{17} W(\text{K.km/s}) / S v(\text{MHz}) \mu^2(\text{D}))]$, fonction de la variable E_u (exprimée en K) est une droite de pente $-\log(e) / T_{\text{rot}}(\text{K})$ et d'ordonnée à l'origine $\log[N(\text{cm}^{-2}) / Z]$.

Remarque : Si les transitions ne sont pas optiquement minces, cette méthode fournit une limite inférieure de la densité projetée.

Nous avons ainsi cherché à déterminer la température de rotation et la densité projetée de toutes les molécules détectées dans IRC+10216, qui présentent des raies optiquement minces et dont nous avons observé au moins deux transitions. (Les raies optiquement minces sont aisément reconnaissables par leur forme en U lorsque la source est résolue; dans le cas d'une source non résolue, elles présentent un profil plat, plus difficile à identifier car il peut être confondu avec le profil parabolique des raies optiquement épaisses -pour plus de détails sur les profils de raies, voir le chapitre 3-). Nous avons préalablement corrigé les températures de brillance dans le lobe principal, T_{mb} , de la dilution due à la taille non négligeable de la source : nous avons assimilé celle-ci à un disque uniforme de diamètre D . La température de brillance de la source, T_B , est alors liée à la température de brillance dans le lobe principal, de largeur à mi-puissance D_o , par la relation :

$$T_{\text{mb}} = [1 - \exp(-\text{Ln}2 (D / D_o)^2)] T_B \quad (\text{II.8})$$

Les résultats des mesures du lobe à mi-puissance de l'antenne de 30m de diamètre de l'IRAM, à différentes fréquences, sont reportés dans la table ci-dessous (voir aussi Baars *et al*, 1987)

Table II.1

Fréquence (MHz)	Lobe à mi-puissance D_0 (")
90000	26
110000	21
140000	17
230000	12

La composition chimique et les conditions d'excitation dans l'enveloppe circumstellaire IRC+10216 ne sont pas uniformes si bien que la région d'émission moléculaire peut avoir des diamètres très différents selon les espèces considérées. Les premiers résultats d'un travail, en cours, de cartographie de diverses émissions moléculaires dans cette enveloppe, nous a permis de déterminer approximativement le diamètre des régions d'émission des molécules présentant des raies fortes. Pour les autres, nous nous appuyons sur les formes de raies pour évaluer l'étendue probable de la région d'émission. Afin d'estimer les incertitudes sur les valeurs de température de rotation et de densité projetée due à la méconnaissance de la dilution de l'émission de l'enveloppe dans le lobe de l'antenne, nous avons calculé les températures de brillance des raies pour 3 diamètres de la source, $D=15''$, $D=25''$ et $D=35''$.

Les **Figures II.4 à II.12**, qui représentent, pour toutes les molécules satisfaisant aux critères énoncés ci-dessus, les mesures de $\log[3kW/8\pi^3S\nu\mu^2]$ en fonction de E_u , ont été tracées dans le cas d'un diamètre de source de $25''$, pour toutes les molécules, sauf pour SiO, SiS et leurs isotopes, pour lesquelles nous avons pris un diamètre de $15''$.

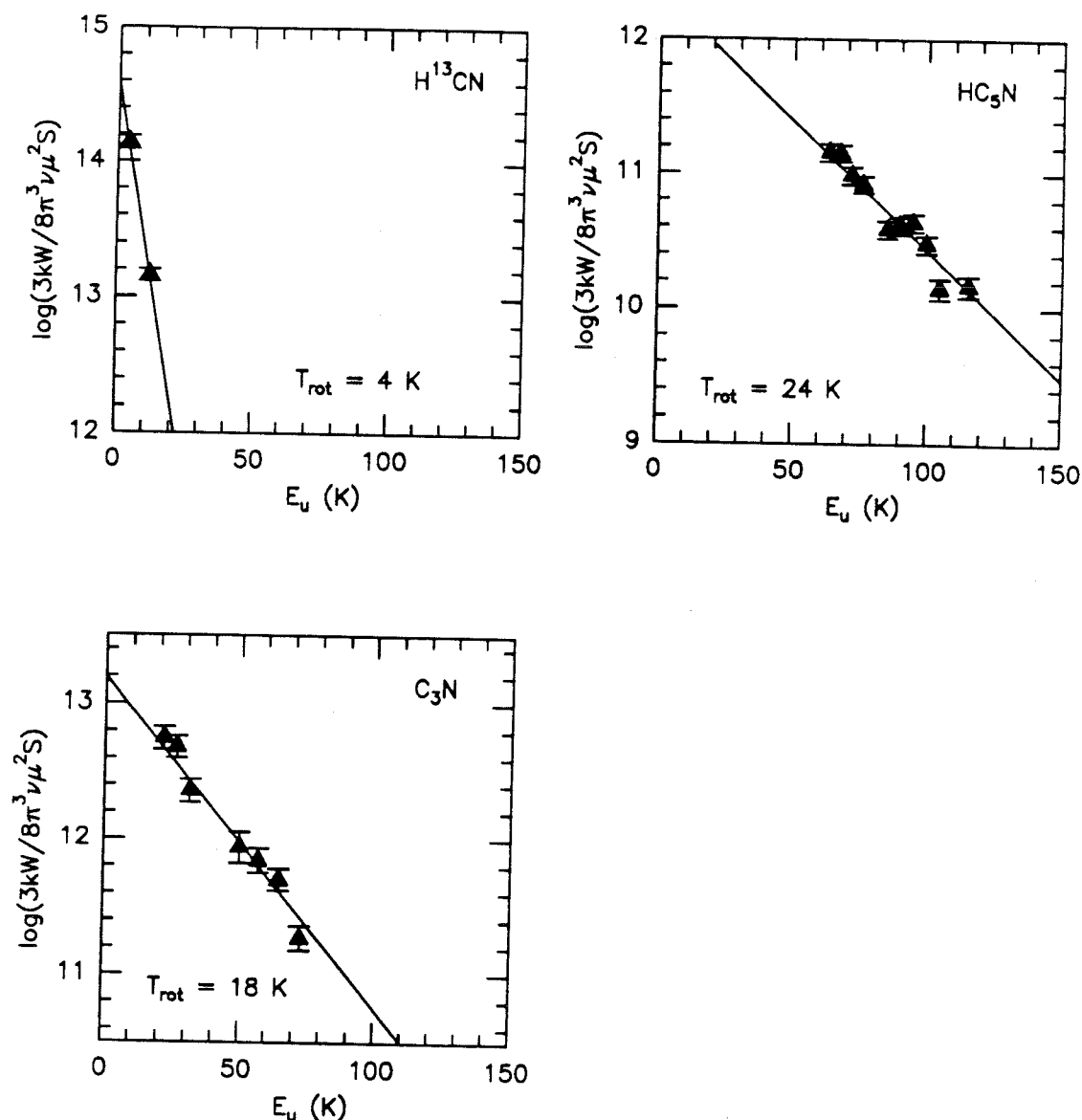


Figure II.4 : Diagrammes d'excitation de H¹³CN, HC₅N, et C₃N. Les températures de brillance ont été calculées en supposant une source d'un diamètre de 25". Les barres d'erreur correspondent à l'incertitude sur les températures de brillance intégrées, W , (qui incluent une incertitude de l'ordre de 10 % sur la calibration des raies et l'incertitude sur l'aire des raies, calculée par ajustement de profils modèles aux profils observés). La température de rotation indiquée sur le diagramme est fournie par la pente de la droite, interpolée par une méthode de moindres carrés.

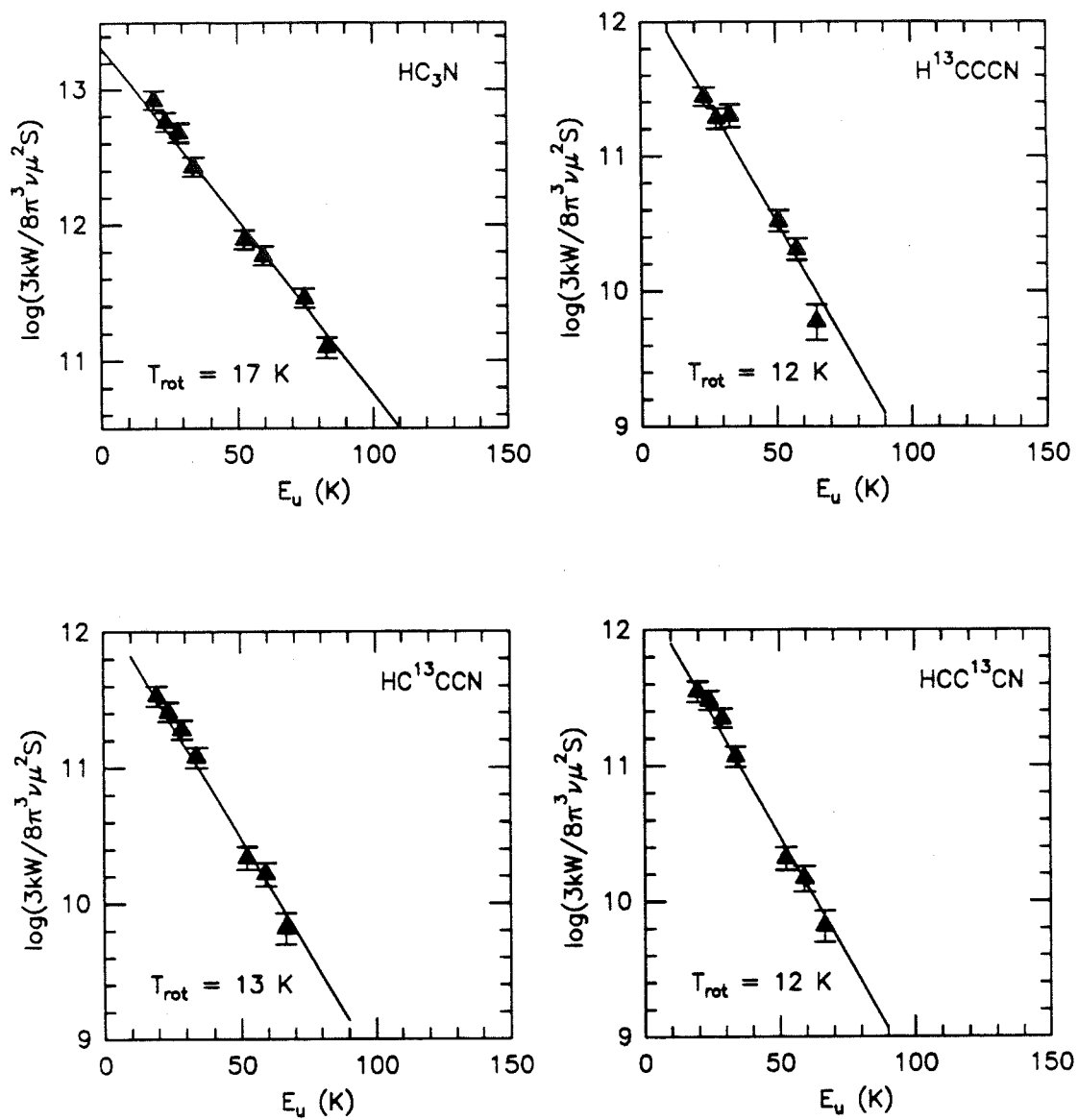


Figure II.5 : Comme la Figure II.4, pour HC_3N et ses isotopes.

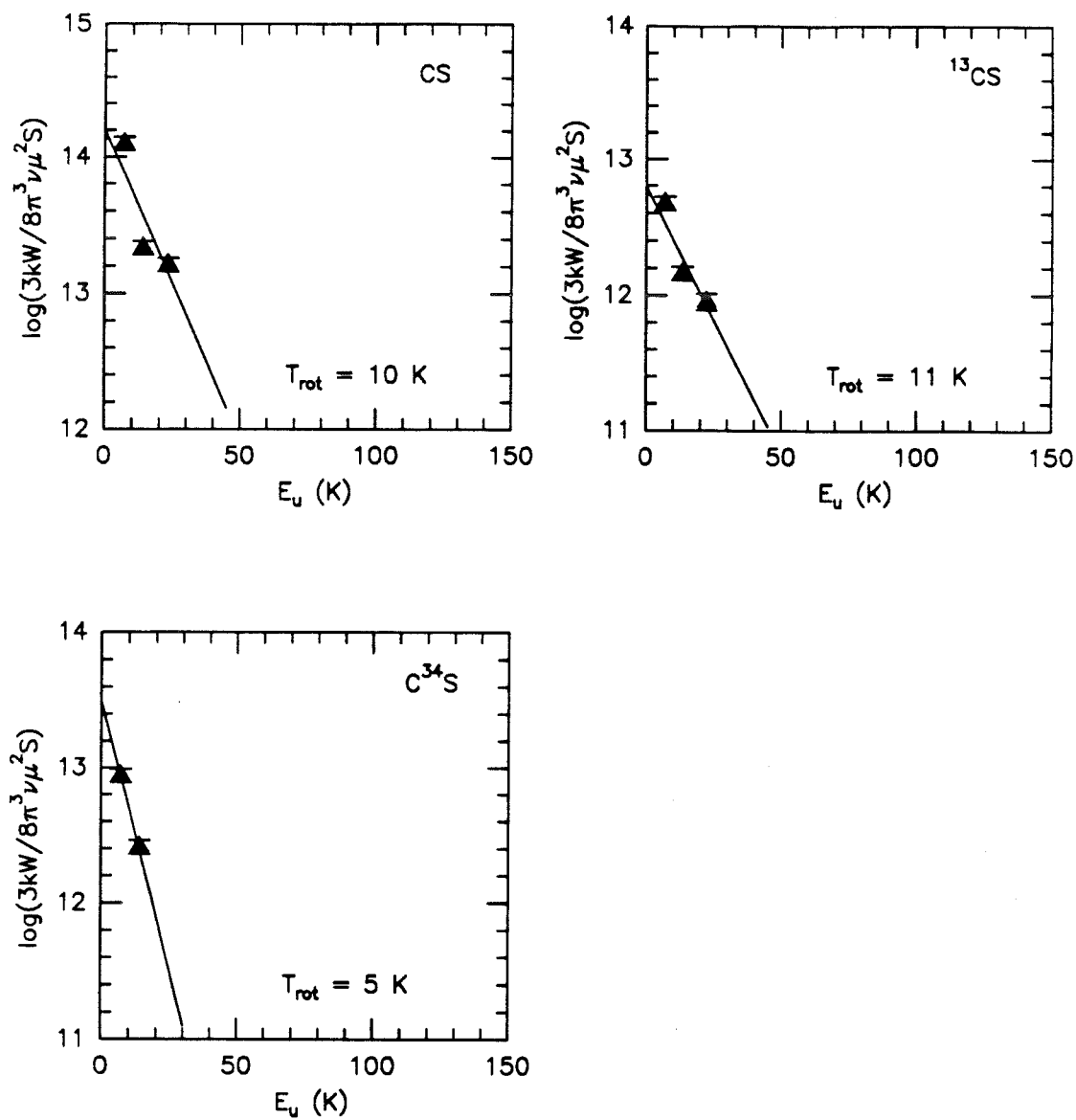


Figure II.6 : Comme la Figure II.4, pour CS et ses isotopes

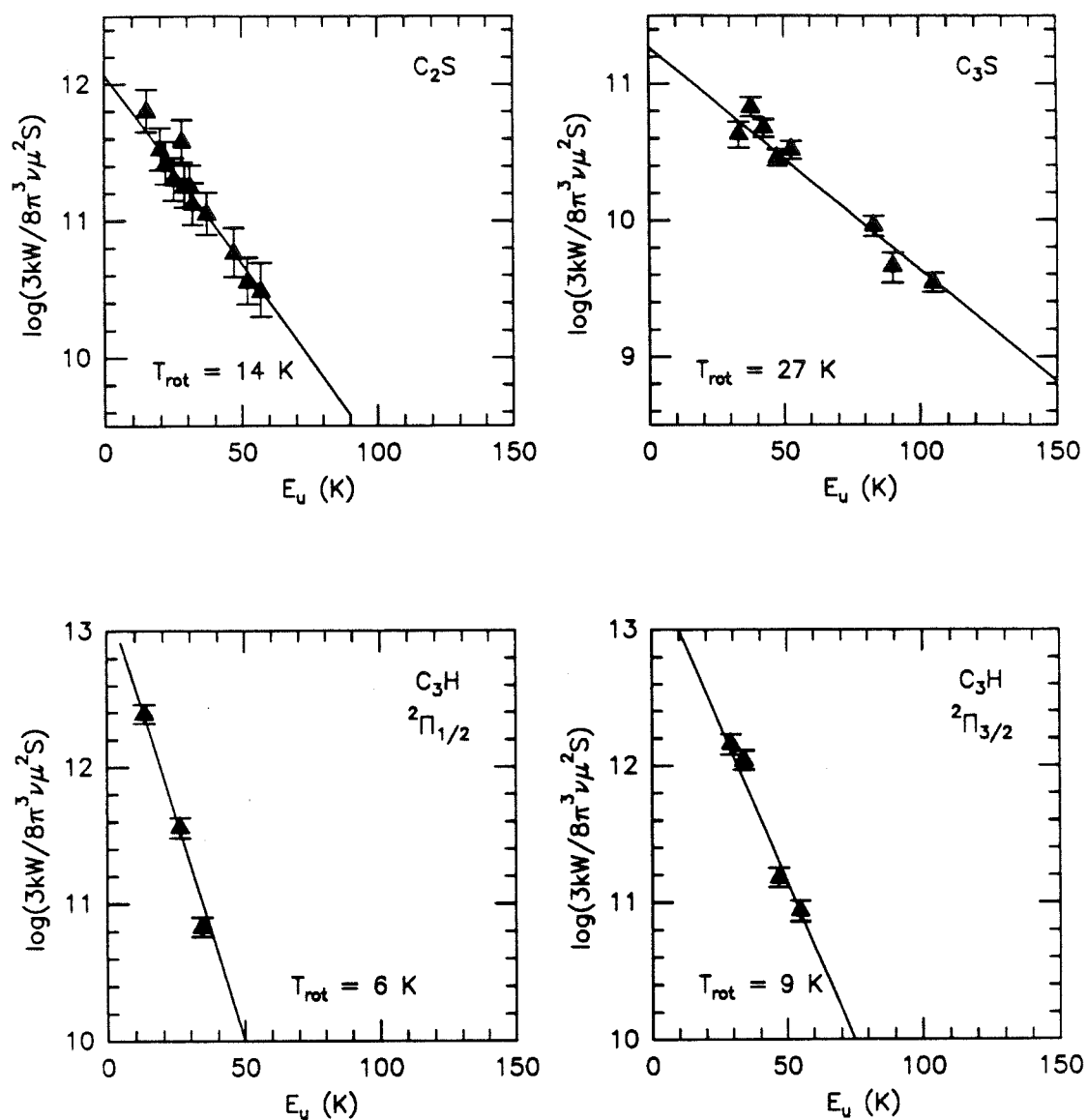


Figure II.7 : Comme la Figure II.4, pour C_2S , C_3S et C_3H .

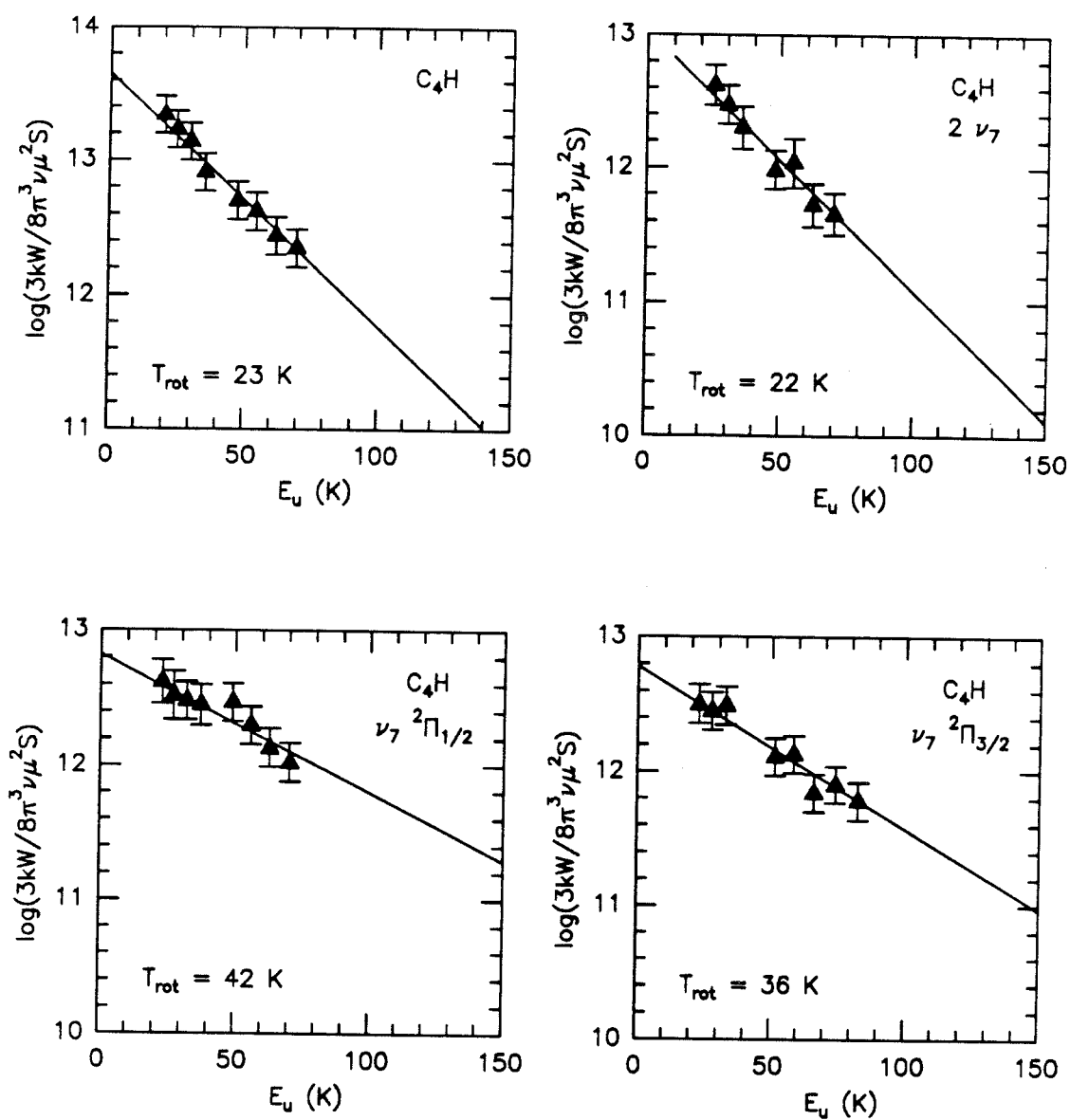


Figure II.8 : Comme la Figure II.4, pour C_4H dans l'état vibrationnel fondamental et dans deux états vibrationnels excités.

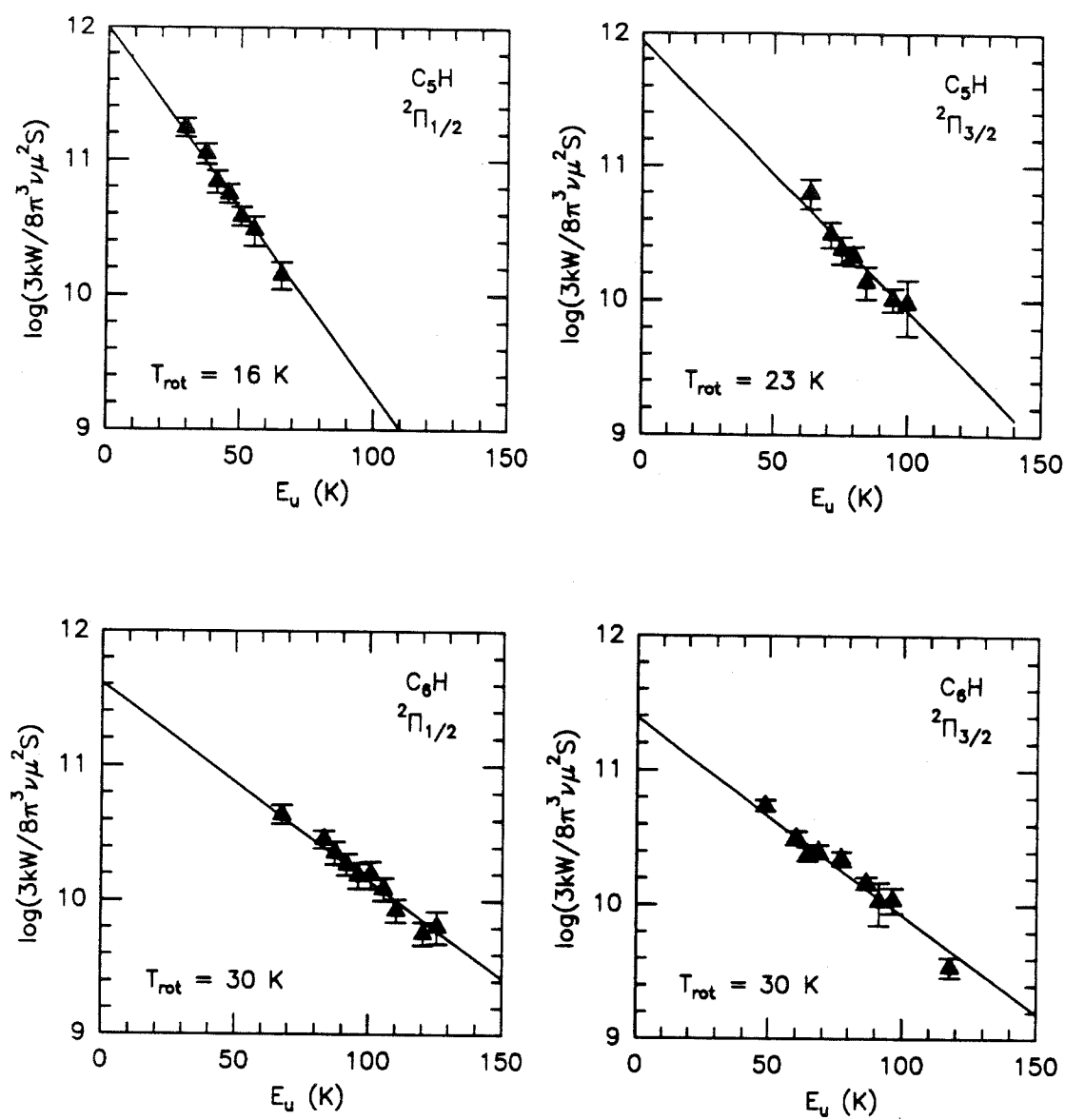


Figure II.9 : Comme la Figure II.4, pour C_5H et C_6H .

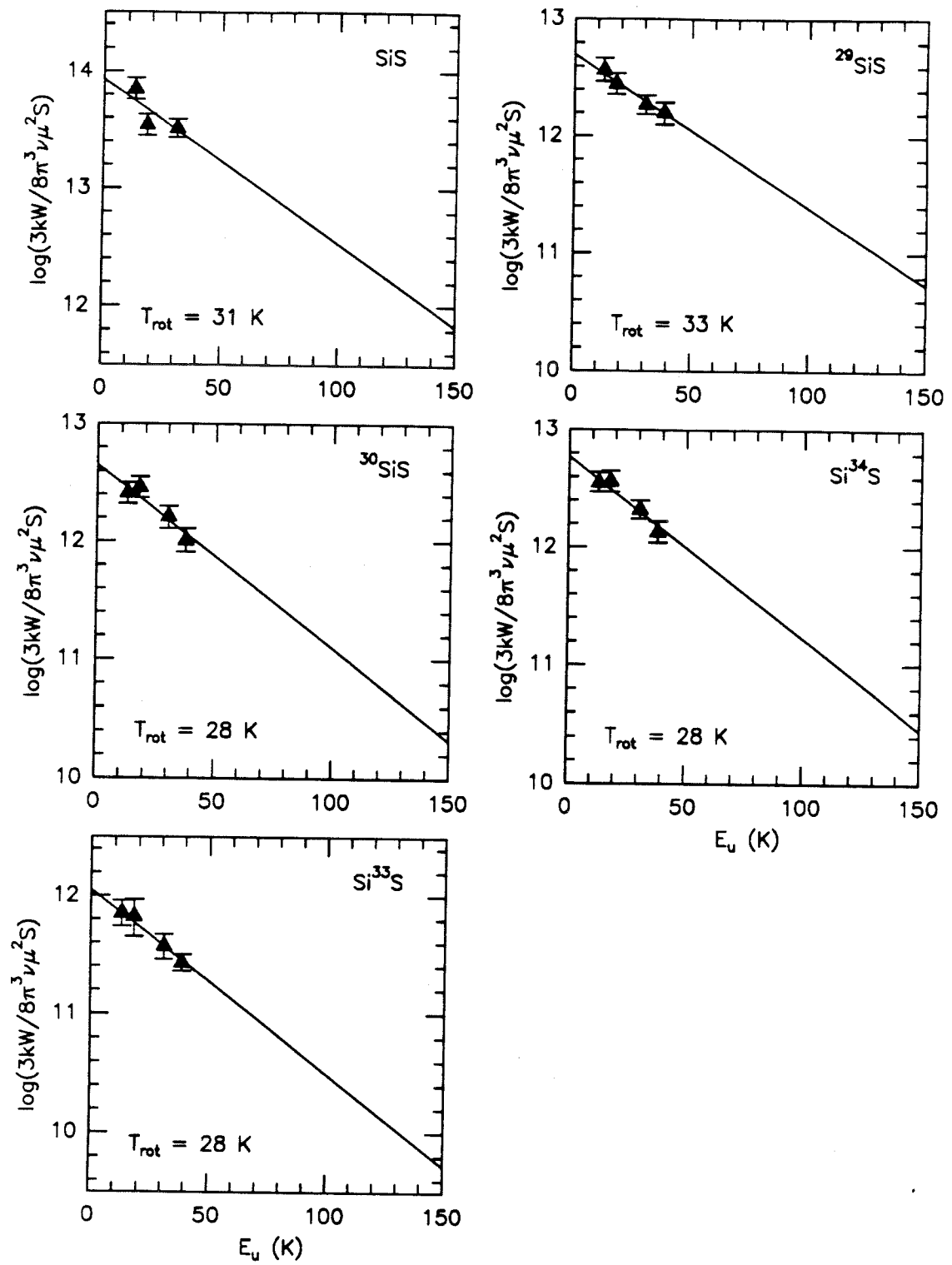


Figure II.10 : Comme la Figure II.4, pour SiS et ses isotopes. Le diamètre de la source est ici de 15".

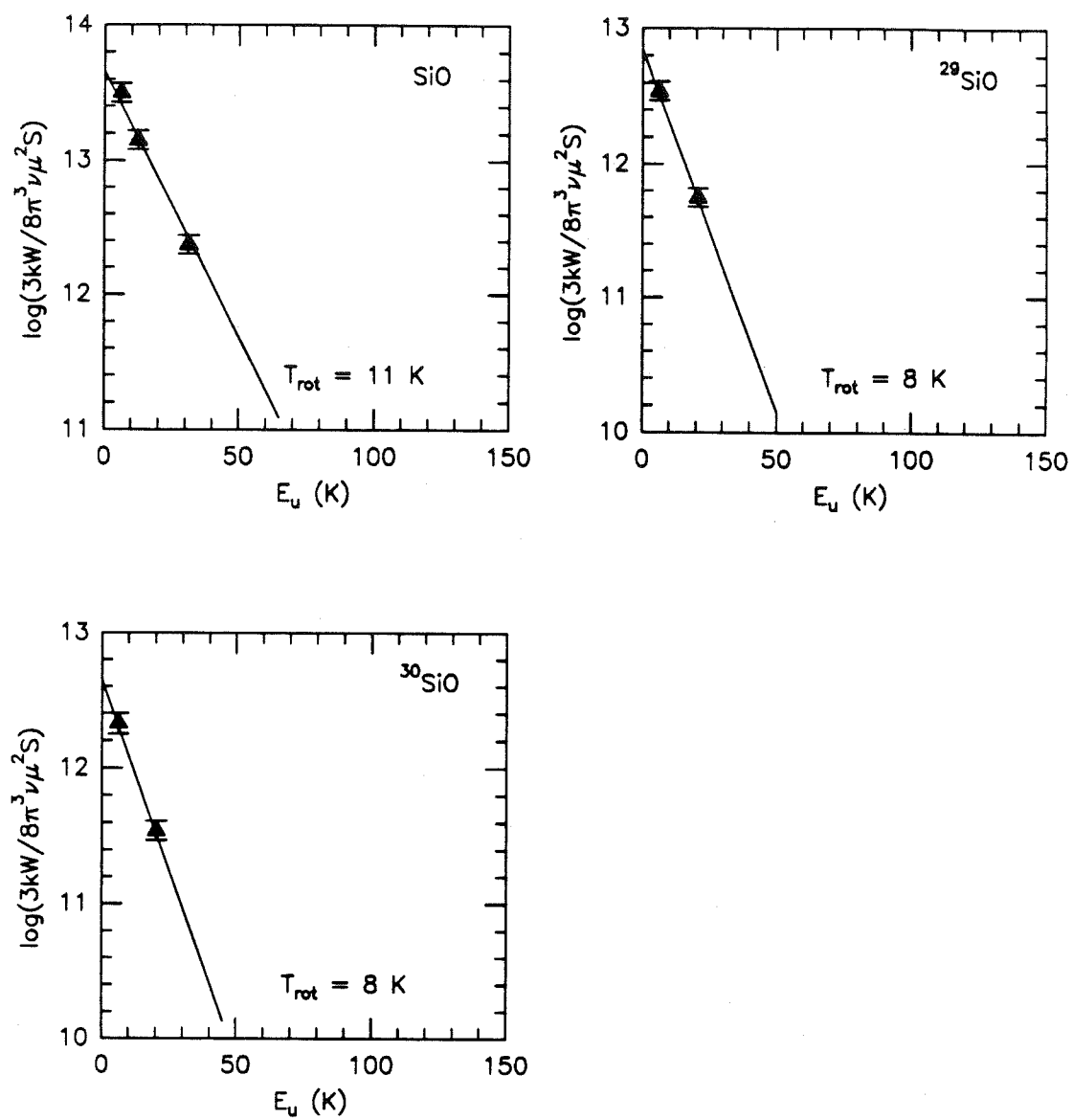


Figure II.11 : Comme la Figure II.4, pour SiO et ses isotopes. Le diamètre de la source est ici de 15".

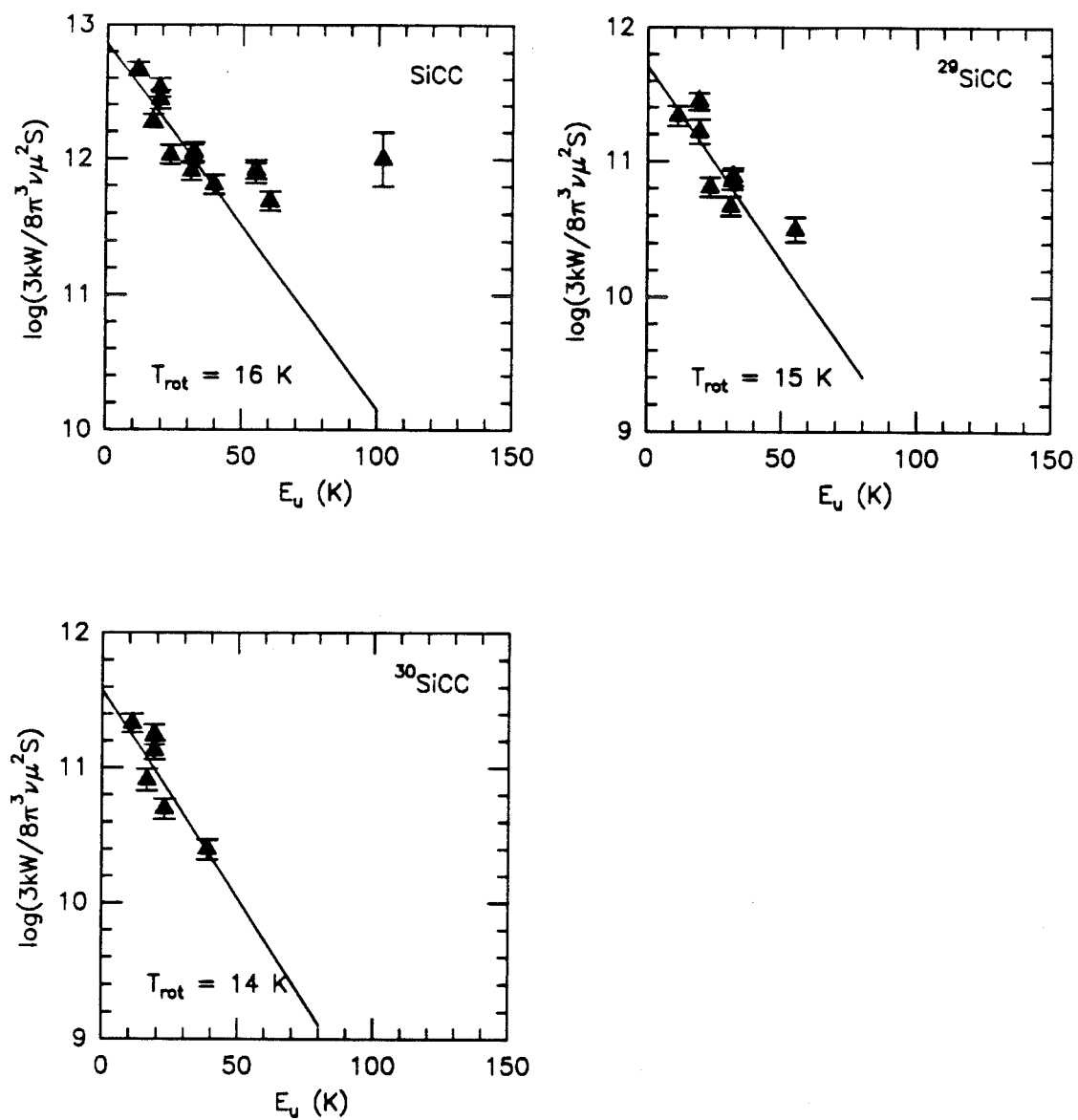


Figure II.12 : Comme la Figure II.4, pour SiCC et ses isotopes.

La première conclusion qui s'impose à l'examen de ces figures est qu'il est possible, pour chaque molécule, à l'exception peut-être de SiCC, de faire passer une droite par les points expérimentaux, c'est-à-dire de définir une température de rotation (cette remarque n'a, bien sûr, de sens que pour les molécules dont on observe au moins trois transitions). Ce résultat est à priori assez étonnant si l'on considère que les conditions d'excitation dans l'enveloppe (température cinétique et champ de rayonnement infrarouge) sont extrêmement inhomogènes (voir le chapitre 3 pour une description détaillée des paramètres physiques de l'enveloppe IRC+10216). Il faut cependant remarquer que les transitions moléculaires observées correspondent à des niveaux excités dont les énergies couvrent des gammes de valeurs limitées (généralement, environ 50 K, ou moins, séparent le niveau le plus excité du niveau le plus bas); il est alors probable que les raies observées proviennent, pour chaque molécule, d'une couche assez localisée de l'enveloppe, dans laquelle les conditions d'excitation sont suffisamment homogènes pour qu'une température rotationnelle puisse être définie. On peut alors déterminer la densité projetée de chaque molécule à partir de l'ordonnée à l'origine de la droite (la fonction de partition Z est calculée en supposant que les populations des niveaux rotationnels suivent une distribution de Boltzman à la température de rotation). Les résultats, qui figurent également en partie dans les articles qui suivent, ont été rassemblés dans la **Table II.2** et dans les **Figures II.13** et **II.14**.

Table II.2 : Températures rotationnelles et densités projetées dans IRC+10216

Molécule	μ (D)	D = 15"		D = 25"		D = 35"	
		T_r	$N(\text{cm}^{-2})$	T_r	$N(\text{cm}^{-2})$	T_r	$N(\text{cm}^{-2})$
H^{13}CN	2.98	3	$1.1 \cdot 10^{15}$	4	$5.2 \cdot 10^{14}$	5	$3.5 \cdot 10^{14}$
HC_3N	3.4	16	$3.2 \cdot 10^{15}$	18	$1.4 \cdot 10^{15}$	20	$7.3 \cdot 10^{14}$
H^{13}CCCN	3.4	12	$2.4 \cdot 10^{14}$	12	$9.3 \cdot 10^{13}$	14	$5.2 \cdot 10^{13}$
HC^{13}CCN	3.4	13	$1.4 \cdot 10^{14}$	13	$6.9 \cdot 10^{13}$	15	$3.8 \cdot 10^{13}$
HCC^{13}CN	3.4	12	$2.0 \cdot 10^{14}$	13	$6.6 \cdot 10^{13}$	14	$4.5 \cdot 10^{13}$
HC_5N	4.33	23	$1.1 \cdot 10^{15}$	24	$4.2 \cdot 10^{14}$	25	$2.6 \cdot 10^{14}$
CS	1.98	7	$2.2 \cdot 10^{15}$	10	$1.1 \cdot 10^{15}$	12	$8.9 \cdot 10^{14}$
^{13}CS	1.98	7	$9.6 \cdot 10^{13}$	11	$5.6 \cdot 10^{13}$	15	$4.4 \cdot 10^{13}$
C^{34}S	1.98	5	$2.7 \cdot 10^{14}$	6	$1.2 \cdot 10^{14}$	7	$8.3 \cdot 10^{13}$

Table II.2 (suite)

Molécule	μ (D)	D = 15"		D = 25"		D = 35"	
		T_r	$N(\text{cm}^{-2})$	T_r	$N(\text{cm}^{-2})$	T_r	$N(\text{cm}^{-2})$
C_2S	2.9	14	$3.8 \cdot 10^{14}$	14	$1.5 \cdot 10^{14}$	16	$8.2 \cdot 10^{13}$
C_3S	3.6	25	$5.9 \cdot 10^{13}$	27	$2.7 \cdot 10^{13}$	31	$1.6 \cdot 10^{13}$
C_3N	2.2	16	$2.1 \cdot 10^{15}$	18	$8.7 \cdot 10^{14}$	20	$6.8 \cdot 10^{14}$
$\text{C}_3\text{H } ^2\Pi_{1/2}$	3.1	6	$5.2 \cdot 10^{14}$	6	$2.1 \cdot 10^{14}$	7	$1.3 \cdot 10^{14}$
$\text{C}_3\text{H } ^2\Pi_{3/2}$	3.1	8	$1.2 \cdot 10^{14}$	9	$5.1 \cdot 10^{13}$	10	$3.2 \cdot 10^{13}$
C_4H	0.9	20	$8.4 \cdot 10^{15}$	23	$3.9 \cdot 10^{15}$	27	$2.6 \cdot 10^{15}$
$\text{C}_4\text{H } 2\nu_7$	0.9	20	$1.6 \cdot 10^{15}$	22	$7.1 \cdot 10^{14}$	26	$4.5 \cdot 10^{14}$
$\text{C}_4\text{H } ^2\Pi_{1/2}$	0.9	33	$1.5 \cdot 10^{15}$	42	$7.1 \cdot 10^{14}$	57	$5.5 \cdot 10^{14}$
$\text{C}_4\text{H } ^2\Pi_{3/2}$	0.9	30	$1.3 \cdot 10^{15}$	36	$6.1 \cdot 10^{14}$	45	$4.3 \cdot 10^{14}$
$\text{C}_5\text{H } ^2\Pi_{1/2}$	4	15	$3.2 \cdot 10^{14}$	18	$9.4 \cdot 10^{13}$	18	$6.0 \cdot 10^{13}$
$\text{C}_5\text{H } ^2\Pi_{3/2}$	4	20	$6.2 \cdot 10^{13}$	23	$2.4 \cdot 10^{13}$	25	$1.4 \cdot 10^{13}$
$\text{C}_6\text{H } ^2\Pi_{1/2}$	5	28	$1.6 \cdot 10^{14}$	30	$6.3 \cdot 10^{13}$	33	$3.9 \cdot 10^{13}$
$\text{C}_6\text{H } ^2\Pi_{3/2}$	5	28	$1.8 \cdot 10^{14}$	30	$6.9 \cdot 10^{13}$	33	$4.3 \cdot 10^{13}$
SiS	1.7	31	$7.0 \cdot 10^{15}$	50	$2.9 \cdot 10^{15}$	120	$3.6 \cdot 10^{15}$
^{29}SiS	1.7	33	$3.6 \cdot 10^{14}$	56	$1.8 \cdot 10^{12}$	127	$2.4 \cdot 10^{14}$
^{30}SiS	1.7	28	$2.6 \cdot 10^{14}$	40	$1.3 \cdot 10^{14}$	69	$1.3 \cdot 10^{14}$
Si^{34}S	1.7	28	$3.4 \cdot 10^{14}$	39	$1.7 \cdot 10^{14}$	67	$1.7 \cdot 10^{14}$
Si^{33}S	1.7	28	$6.4 \cdot 10^{13}$	42	$3.5 \cdot 10^{13}$	68	$3.2 \cdot 10^{13}$
SiO	3.1	11	$3.9 \cdot 10^{14}$	14	$1.9 \cdot 10^{14}$	17	$1.6 \cdot 10^{14}$
^{29}SiO	3.1	8	$4.8 \cdot 10^{13}$	9	$2.4 \cdot 10^{13}$	12	$1.9 \cdot 10^{13}$
^{30}SiO	3.1	8	$3.1 \cdot 10^{13}$	9	$1.4 \cdot 10^{13}$	12	$1.1 \cdot 10^{13}$
$^{28}\text{SiCC}$	3.2	15	$7.6 \cdot 10^{14}$	18	$4.0 \cdot 10^{14}$	24	$2.6 \cdot 10^{14}$
$^{29}\text{SiCC}$	3.2	15	$5.5 \cdot 10^{13}$	16	$2.6 \cdot 10^{13}$	21	$1.9 \cdot 10^{13}$
$^{30}\text{SiCC}$	3.2	14	$4.1 \cdot 10^{13}$	15	$1.7 \cdot 10^{13}$	18	$1.4 \cdot 10^{13}$

(1) moment dipolaire non mesuré, valeur supposée par Cernicharo et al, 1986b.

(2) moment dipolaire non mesuré, valeur supposée par Cernicharo et al, 1987a.

A l'examen de ce tableau, il apparaît immédiatement que les températures de rotation dépendent de la taille supposée de la source, et ce d'autant plus fortement que celle-ci est plus faible. Les estimations de densités projetées y sont un peu moins sensibles : elles dépendent de la taille de la source via la valeur de l'ordonnée à l'origine de la droite, $\log(N/Z)$, et également via la température rotationnelle, qui intervient dans le calcul de la fonction de partition, et les deux dépendances se compensent partiellement. En outre, pour certaines molécules (C_5H et C_6H), la valeur du moment dipolaire n'est pas connue, ce qui introduit une incertitude supplémentaire sur la densité projetée N que l'on calcule (elle varie en μ^{-2}). Enfin, pour quelques molécules ($H^{13}CN$, CS et ses isotopes, SiO et ses isotopes et C_3H), la température de rotation que l'on détermine ainsi est faible, si bien qu'il n'est plus justifié de négliger le rayonnement cosmologique, et que les densités projetées calculées en faisant cette hypothèse sont sous estimées. Cependant, dans le cas le plus défavorable, celui de $H^{13}CN$, la correction introduite par la prise en compte du rayonnement à 2.7 K n'excède pas un facteur 2.

Malgré ces incertitudes, il est cependant possible, au moins qualitativement, de dégager des résultats portés dans la **Table II.2** un certain nombre de conclusions (nous ne discutons pas en détail les rapports d'abondances isotopiques, dont la détermination fait l'objet du chapitre 4, nous nous contentons de signaler ici les valeurs fournies par les rapports de densités projetées et les conclusions que l'on peut en tirer sur l'opacité probable des raies).

- les raies de $H^{13}CN$ ne sont probablement pas, à en juger par leurs formes, optiquement minces, si bien que la température de rotation déduite des intensités intégrées des raies peut être assez différente de sa valeur réelle; ajoutons que cette détermination ne repose que sur l'observation de deux transitions, si bien qu'une erreur sur l'intensité de l'une des raies (calibration, mauvais pointage) peut fausser gravement la température de rotation. La cartographie de HCN (1-0) indique que la région d'émission de cette espèce a un diamètre (déconvolué du lobe de l'antenne) d'environ $25''$. Si l'on admet une température de rotation de 4K, notre calcul de la densité projetée de la molécule, qui néglige le rayonnement de fond continu, sous-estime celle-ci d'un facteur 2 environ. En supposant un rapport $^{12}C/^{13}C$ de 50 (voir le chapitre 4), nous obtenons donc une limite inférieure de $2.5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, à la densité projetée de HCN .

- Les trois isotopes ^{13}C de HC_3N fournissent des températures de rotation en excellent accord les unes avec les autres (de l'ordre de 13 K, si l'on considère que la taille de la source est au moins de l'ordre de $25''$, selon les estimations préliminaires de Kahane *et al*, établies à partir d'une carte d'émission de HC_3N). Cette valeur, assez faible, de la température de

rotation pourrait indiquer que les raies observées proviennent de régions relativement externes de l'enveloppe. L'isotope principal, HC_3N , fournit une valeur un peu plus élevée de la température de rotation (~ 18 K); cependant, les raies de cette espèce sont probablement optiquement épaisses, en particulier les transitions à plus basse fréquence qui correspondent à des niveaux plus peuplés, si bien que les températures de rotation fournies par l'isotope principal sont vraisemblablement surestimées. L'opacité des raies de HC_3N conduit également à une sous-estimation de la densité projetée de la molécule, comme en témoigne le rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$, de l'ordre de 20, que l'on obtient en faisant le rapport des densités projetées de HC_3N et de chacun de ses isotopes, alors que, d'après les déterminations faites par Kahane *et al*, 1988a (voir aussi le chapitre 4), ce rapport isotopique est voisin de 50. A partir des densités projetées des isotopes ^{13}C , on peut estimer la densité projetée de l'isotope principal à $4 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$.

- HC_5N , dont on supposera l'émission d'une étendue de l'ordre de $25''$, (ce qui est en accord avec l'évolution des profils de raie, en fonction de la fréquence : ils indiquent une source peu résolue à basse fréquence, nettement résolue à haute fréquence), présente une température rotationnelle de l'ordre de 25 K et une densité projetée de $4 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. On peut remarquer, en comparant les diagrammes d'excitation de HC_5N et de HC_3N , que les raies de HC_5N correspondent à des niveaux plus excités que celles de HC_3N ; il est alors possible que l'émission de HC_5N provienne principalement de régions un peu plus internes de l'enveloppe, où la température d'excitation est, comme le suggère notre mesure, plus élevée.

- CS et son isotope ^{13}CS , pour lesquels nous avons inclus dans le diagramme d'excitation les paramètres de la transition $J=5-4$, à 1mm, indiquent une température rotationnelle de 10 à 11 K, si l'on suppose que le diamètre de la source est de $25''$, ce qui est cohérent avec les formes des raies de ^{13}CS (celle de ^{12}CS , sont probablement un peu optiquement épaisses). Pour l'isotope C^{34}S , la température rotationnelle n'est établie qu'à partir de l'observation de deux transitions, si bien qu'elle souffre d'incertitudes importantes. La faible valeur de température de rotation déduite des isotopes ^{12}CS et ^{13}CS ne semble pas devoir s'expliquer par un confinement de la molécule dans les régions les plus externes de l'enveloppe; il s'agit probablement plutôt d'un effet de sélection : nos observations ne concernent que les niveaux faiblement excités de la molécule et il est fort possible que la prise en compte de raies issues de niveaux d'énergies plus élevées conduirait à une valeur plus grande de la température de rotation (le diagramme d'excitation de C_4H dans l'état vibrationnel fondamental (**Figure II.8**) pourrait indiquer un tel fléchissement de pente entre les quatre points représentatifs des transitions les plus basses et ceux des transitions plus élevées; un effet analogue se manifeste probablement aussi pour SiCC). En supposant une source de $25''$ de diamètre, les rapports de densités projetées, qui fournissent les valeurs

$^{12}\text{CS}/^{13}\text{CS} = 20$, $\text{C}^{32}\text{S}/\text{C}^{34}\text{S} = 10$, indiquent que les raies de ^{12}CS sont probablement optiquement épaisses car ces rapports sont sous-estimés (cette conclusion est également en accord avec la forme, peu creusée, des raies de l'isotope principal, même à haute fréquence, où la source est largement résolue). A partir des densités projetées des isotopes ^{13}CS et C^{34}S , et des rapports isotopiques $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 47$ et $^{32}\text{S}/^{34}\text{S} = 20$ (Kahane *et al*, 1988a), on obtient pour l'isotope principal une densité projetée de $2.5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, qui est peut-être un peu sous-estimée, en raison de l'hypothèse, non parfaitement justifiée ici, d'une température de fond continu négligeable devant la température de rotation de la molécule.

- Les raies de C_2S présentent une forme en U bien marquée, même à basse fréquence, ce qui indique une source étendue, dont la diamètre est probablement d'au moins 25". La relativement faible température d'excitation (14 K) de la molécule traduit vraisemblablement une émission qui provient principalement de couches assez extérieures de l'enveloppe. La densité projetée de la molécule est estimée à $1.5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$.

- Pour C_3S , dont l'émission n'a pas non plus été cartographiée, étant donnée la faiblesse des raies, nous supposons, en nous fondant également sur la forme des raies, un diamètre de source de 25". La température rotationnelle correspondante est de 27 K et la densité projetée de $3 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$.

- la molécule C_3N , qui correspond à des températures rotationnelles et des densités projetées tout à fait comparables à celle de HC_3N ($T_{\text{rot}} = 18 \text{ K}$ et $N = 9 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ pour D ~ 25"), présente elle-aussi probablement une émission assez étendue, comme en témoignent les profils en U des raies de C_3N , même à basse fréquence.

- Les raies de C_3H fournissent des valeurs beaucoup plus faibles de température de rotation. La température légèrement plus élevée obtenue à partir des transitions de l'échelle $\Omega = 3/2$ peuvent s'expliquer par la différence d'énergie de 20 K entre les deux échelles, mais il faut remarquer que la détermination des températures de rotation, qui s'appuie sur un très petit nombre de mesures d'aires de raies, présente une incertitude qui est probablement comparable à la différence des deux températures. L'étendue de l'émission moléculaire n'a pas été mesurée directement pour cette molécule. Elle est probablement de l'ordre de 25" à 35", les raies présentant à toutes les fréquences une forme en U marquée, caractéristique des sources résolues. Il est alors vraisemblable que la faible température de rotation de cette molécule traduit, au moins en partie, le fait que l'essentiel de l'émission provient de couches assez extérieures de l'enveloppe (l'effet est peut-être accentué par nos observations, qui ne portent que sur des niveaux peu élevés de la molécule). La densité projetée totale de la molécule C_3H , est estimée à environ $2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, valeur peut-être un peu sous-estimée à cause de la faible température rotationnelle.

- C_4H , dont l'émission est, d'après nos observations, très étendue ($D \sim 35''$) se manifeste par des raies nombreuses : celles de l'état vibrationnel fondamental indiquent une température de rotation de 27K, pour un diamètre de 35"; les transitions rotationnelles des états vibrationnels excités v_7 , qui se situent pourtant quelques 200 K au dessus du fondamental (Yamamoto *et al*, 1987) indiquent des températures rotationnelles de l'ordre de 50 K seulement, pour la même taille de source; les transitions de l'état vibrationnel $2v_7$ conduisent même à une température de rotation semblable à celle de l'état vibrationnel fondamental. Ce comportement confirme probablement que l'excitation des niveaux vibrationnels est dominé par le pompage radiatif à partir de l'état vibrationnel fondamental, plutôt que par les collisions (Yamamoto *et al*, 1987). La densité projetée totale de C_4H est estimée à $4 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-2}$, dont plus du tiers provient de molécules dans des états vibrationnellement excités.

- Pour C_5H , nous supposons une source de 25" de diamètre. Les raies de l'état $^2\Pi_{1/2}$ indiquent une température rotationnelle de 18 K, alors que ceux de l'état $^2\Pi_{3/2}$, dont les niveaux se situent 34 K au dessus, conduisent à une température rotationnelle de 5 K plus élevée; cette différence est ici nettement plus significative que dans le cas de C_3H car le nombre de raies observées est beaucoup plus important et la dispersion des mesures est faibles. La densité projetée totale de C_5H est de 10^{14}cm^{-2} , elle est dominée par les molécules dans l'état $^2\Pi_{1/2}$.

- Dans le cas de C_6H , pour laquelle nous supposerons également un diamètre de 25", la différence d'énergie entre les deux échelles est plus faible (19 K) et les deux séries de transitions indiquent la même température de rotation (30 K). La densité projetée totale de C_6H est un peu supérieure à 10^{14}cm^{-2} , les molécules se répartissant également dans les deux états.

- A 3mm, les isotopes de SiS présentent des raies modérément creuses que nous interprétons comme des raies optiquement minces issues d'une source non résolue; à 2mm, la forme en U des profils est un peu plus marquée. Ces résultats sont cohérents avec notre estimation de taille de la source SiS, de l'ordre de 15". Les températures de rotation calculées présentent une incertitude non négligeable (seules 4 transitions sont observées pour chaque molécule) et indiquent une valeur de l'ordre de 30 K. La densité projetée de SiS (calculée directement ou à partir des densités projetées des isotopes rares et des rapports isotopiques du soufre et du silicium dans IRC+10216, très proches des rapports terrestres) est voisine de $7 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-2}$.

- SiO et de ses isotopes présentent également une émission peu étendue ($D \sim 15''$). Comme dans le cas de CS, les faibles valeurs de rotation déduites des observations semblent

pouvoir s'expliquer par un effet de sélection des niveaux de plus faible énergie (on notera, en comparant les valeurs obtenues pour SiO et ses isotopes que, comme pour CS, l'addition d'une transition d'énergie plus élevée dans le diagramme conduit à une température de rotation un peu supérieure). Les raies de l'isotope principal ont une forme plutôt parabolique, qui traduit l'opacité non négligeable des raies. Les rapports isotopiques du silicium que l'on calcule à partir des densités projetées de SiO et de ses isotopes, sont d'ailleurs sous-estimés (~ 8 pour $^{28}\text{Si}/^{29}\text{Si}$ et ~ 13 pour $^{28}\text{Si}/^{30}\text{Si}$). La densité projetée de l'isotope principal, calculée à partir de celles des isotopes rares en supposant des valeurs respectives de 19 et de 29 pour les rapports isotopiques $^{28}\text{Si}/^{29}\text{Si}$ $^{28}\text{Si}/^{30}\text{Si}$ (voir le chapitre 4), est voisine de $9 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. Cette valeur est probablement un peu sous-estimée en raison de la faible température de rotation des molécules, qui rend le rayonnement de fond continu non totalement négligeable.

- Il est probable que SiCC et son isotope $^{29}\text{SiCC}$ présentent des diagrammes d'excitation qui ne peuvent s'expliquer par une température de rotation unique : les transitions issues de niveaux d'énergie inférieurs à 50 K fournissent une température de rotation très voisine pour les trois isotopes, d'environ 16 K, si l'on suppose une source de 25" de diamètre. En revanche quatre transitions issues de niveaux plus élevés (une pour l'isotope ^{29}Si) indiquent une température rotationnelle beaucoup plus élevée (difficile à préciser compte-tenu de la dispersion des points de mesures). Les densités projetées indiquées dans la Table II.2 ne tiennent compte que des populations des niveaux d'énergie inférieure à 50 K. Les rapports isotopiques que l'on en tire, sont relativement incertains; leurs valeurs (~ 15 pour $^{28}\text{Si}/^{29}\text{Si}$, ~ 24 pour $^{28}\text{Si}/^{30}\text{Si}$, et ~ 1.5 pour $^{29}\text{Si}/^{30}\text{Si}$) diffèrent un peu des rapports terrestres, (19, 29 et 1.5), que l'on attend pour le silicium dans une enveloppe de géante rouge, et indiquent probablement que l'isotope principal est légèrement optiquement épais. La densité projetée de SiCC, calculée à partir de celles des isotopes rares en supposant des rapports isotopiques terrestres, est de $5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. Il s'agit d'une limite inférieure, car nous avons négligé les populations des niveaux d'énergie supérieure à 50 K.

Les températures de rotation ainsi déterminées présentent une grande dispersion, qui indique probablement que les émissions des diverses molécules proviennent de différentes régions de l'enveloppe. Ces températures de rotation ne peuvent pas être interprétées comme des mesure de la température cinétique du gaz car les molécules ne sont pas thermalisées, l'excitation des niveaux rotationnels est en effet en grande partie radiative. En revanche, les molécules comme C_5H , C_6H , et SiCC, qui présentent plusieurs échelles de niveaux rotationnels qui ne sont couplées entre elles que très faiblement par rayonnement, permettent, par la mesure de la température rotationnelle "inter-échelle", une estimation de la

température cinétique du gaz. La valeur déduite des observations de C_5H est assez imprécise, mais indique une température cinétique du gaz de 50 à 90 K (Cernicharo *et al*, 1986b), C_6H fournit une valeur supérieure à 70 K (Cernicharo *et al*, 1987a) et SiCC conduit à une valeur de l'ordre de 100 K (Thaddeus *et al*, 1984); ces estimations de la température cinétique sont tout-à-fait compatibles avec les valeurs généralement admises pour l'enveloppe IRC+10216 (voir le chapitre 3).

L'effet de sélection, que nous évoquions précédemment pour interpréter les faibles températures rotationnelles fournies par les molécules les plus légères, se manifeste clairement si l'on trace (voir **Figure II.13**) la température de rotation des molécules en fonction de la constante de rotation B : on constate que les molécules lourdes, de petites valeurs de B , dont on observe à 2 et 3 mm des transitions de niveaux de nombres quantiques J et donc d'énergie plus élevés (car les fréquences des raies sont proportionnelles à J , alors que les énergies sont en J^2), présentent des températures de rotation relativement élevées (entre 15 et 30 K). En revanche CS, SiO, et $H^{13}CN$ (et dans une moindre mesure C_3H), qui sont des molécules beaucoup plus légères, fournissent des températures de rotation inférieures ou égales à 10 K. L'augmentation des températures d'excitation des transitions avec l'énergie des niveaux supérieurs s'explique probablement par l'effet indiqué par Morris (1975) : lorsque les niveaux sont excités radiativement, pour maintenir une population significative dans le niveau J , le taux d'absorption des photons doit être un peu supérieur au taux de désexcitation spontanée à partir du niveau J . Or ce taux de désexcitation augmente avec J si bien que, plus le niveau J est élevé, plus les molécules doivent être soumises à un flux de photons important pour maintenir la population du niveau et produire une émission significative dans la raie $J \rightarrow J-1$. Les émissions dans les raies issues de niveaux élevés fournissent donc des températures d'excitation plus élevées. Les densités projetées des principales molécules observées dans IRC+10216 sont reportées dans la **Figure II.14**. Pour les molécules qui figurent dans la **Table II.2**, nous avons indiqué la valeur de densité projetée qui correspond à la taille la plus probable de la source, pour celles qui n'y figurent pas, la taille de la source et les références de l'article où sont prises les valeurs figurent dans la légende. Trois familles de chaînes carbonées, HC_nN , C_nN et C_nS , ont des comportements très semblables : les densités décroissent (typiquement d'un facteur 10 pour les premiers membres de la famille, plus lentement ensuite, dans le cas des cyanopolyynes) lorsque le nombre d'atomes de carbone augmente. Dans le cas de la chaîne C_nH , les densités projetées ont un comportement "oscillant" qui traduit le fait que les molécules à nombre pair d'atomes, sont beaucoup plus abondantes que celles à nombre impair d'atomes (l'effet s'estompe lorsque n devient grand : C_6H et C_5H ont pratiquement la même abondance). Les

molécules siliciées sont relativement abondantes dans IRC+10216 et présentent des densités projetées comparables (quelques 10^{15} cm^{-2}).

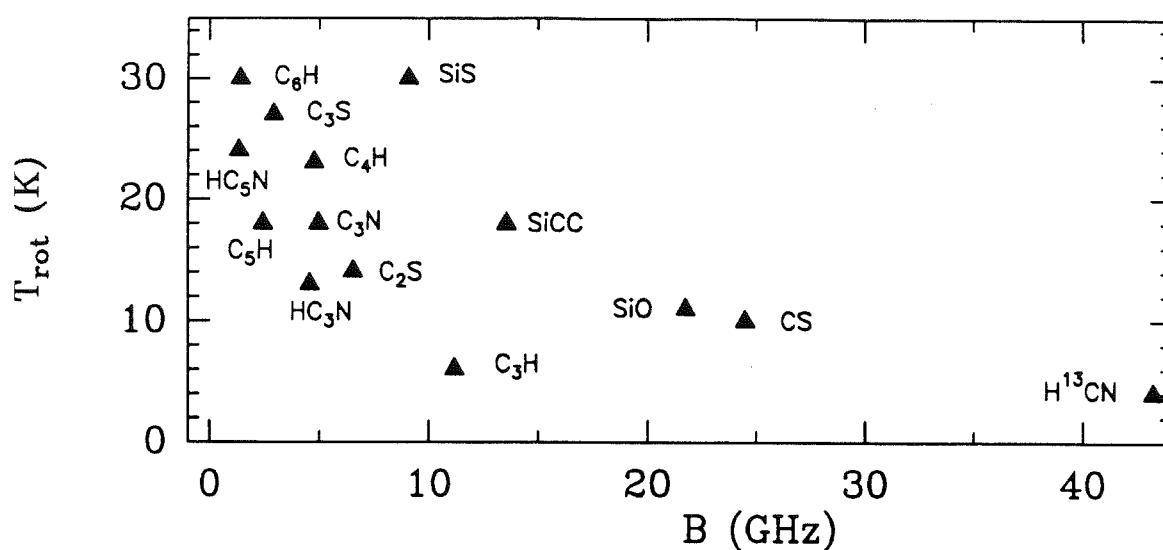


Figure II.13 : Température de rotation et constante rotationnelle B .

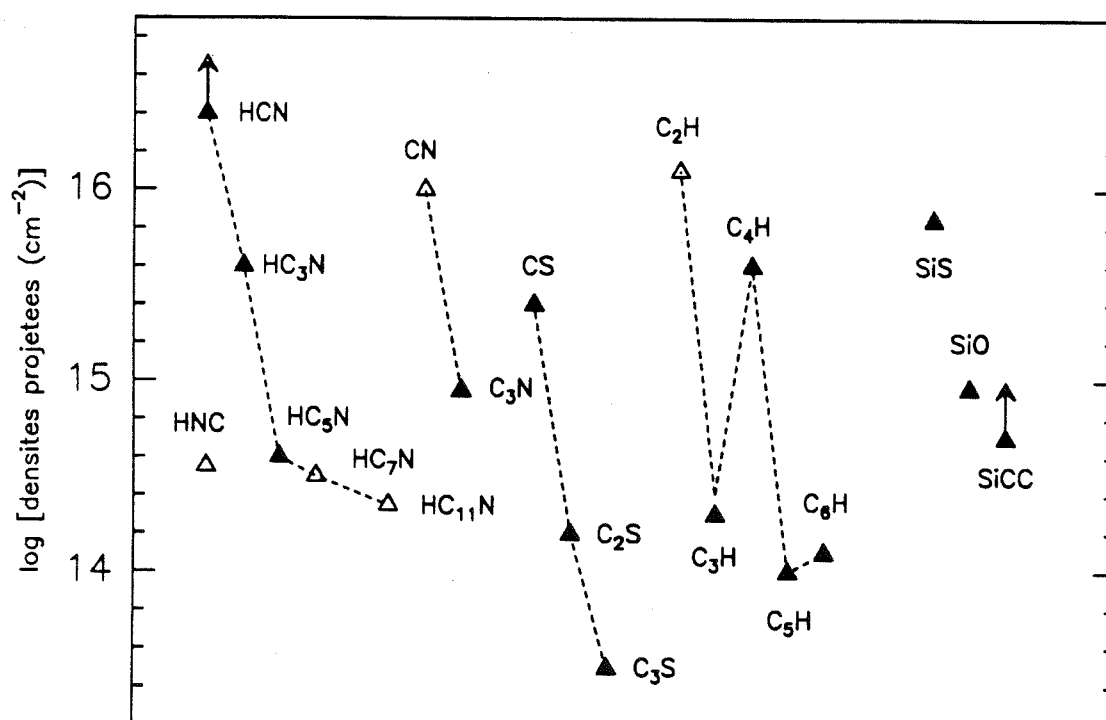


Figure II.14 : Densités projetées des principales molécules observées dans l'enveloppe IRC+10216. Les densités projetées de C₂H, CN, HC₇N et HC₁₁N ont été calculées par Cernicharo et al (1987a) en supposant une source de 25" de diamètre. Les valeurs indiquées pour HCN et SiCC constituent des limites inférieures.

B. Observations d'OrionA

Les observations d'OrionA ont été effectuées avec l'antenne de 30m de l'IRAM au Pico Veleta, dans les mêmes conditions que pour IRC+10216, en octobre 1985, mars 1986 et octobre 1987. La couverture spectrale à 3mm a été réalisée en mode double bande, avec un récepteur Schottky, puis un récepteur SIS. Les 30 spectres double bande observés couvrent environ 14 GHz entre 83 et 115 GHz, selon la répartition représentée dans la **Figure II.15**.

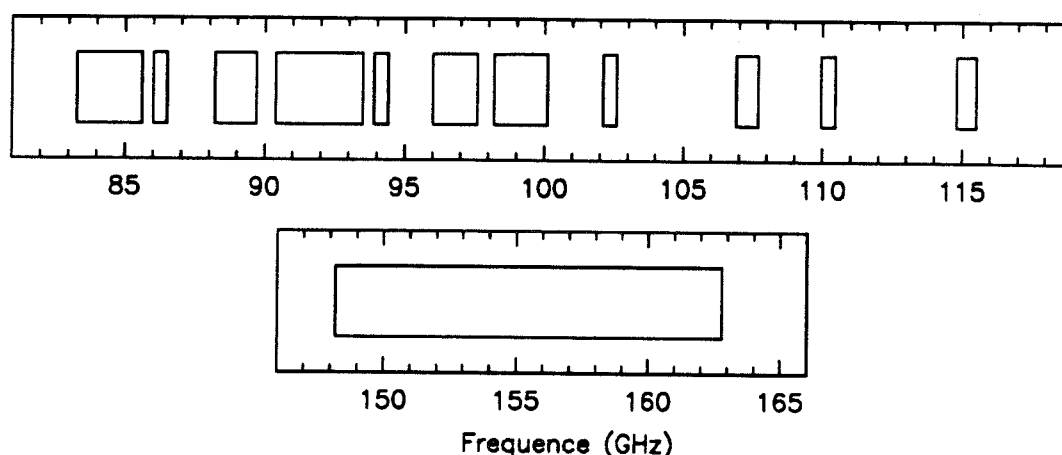


Figure II.15 : Répartition en fréquences de la couverture spectrale d' Orion réalisée avec l'antenne de 30m de l'IRAM.

Le bruit quadratique moyen des spectres est de 0.05 K, ce qui représente un temps d'intégration de l'ordre de 5 mn par spectre de 500 MHz de large. La plupart des spectres sont très riches en raies et la limite de confusion est souvent atteinte; en outre, à 3mm, la résolution spectrale de 1 MHz, qui correspond à une résolution en vitesse de 3 km/s environ, n'est pas tout-à-fait suffisante pour que les formes des raies soient clairement définies (voir le spectre représenté **Figure II.16**). La séparation entre raies de la bande image et de la bande signal est donc particulièrement délicate, d'autant plus que de nombreuses raies, en particulier des raies fortes (> 0.5 K), demeurent non identifiées. Elles appartiennent probablement, pour bon nombre d'entre elles, à des niveaux vibrationnels excités, mais la grande densité de raies dans les spectres rend les risques de coïncidence accidentelle de fréquence élevés et l'identification des raies s'avère particulièrement délicate.

La couverture spectrale à 2mm a été réalisée en mode simple bande, avec un récepteur SIS. Les 30 spectres de 500 MHz de large observés couvrent intégralement la bande 148.2

GHz à 162.8 GHz. Le temps d'intégration moyen par spectre est de 10 à 15 mn, et le bruit quadratique moyen de 0.03 K. La densité des raies dans cette gamme de fréquences est très élevée, comme en témoigne le spectre présenté dans la **Figure II.17**.

Contrairement à la couverture spectrale d'IRC+10216, pour laquelle nous avons effectué un travail systématique d'identification des raies, la couverture spectrale d'Orion est plutôt destinée à la recherche de quelques molécules "terrestres", en particulier de composés organiques assez complexes, aux constantes spectroscopiques bien connues, (citons par exemple la glycine et l'urée, qui ont déjà fait l'objet de recherches infructueuses). Nous l'avons également utilisée comme élément de vérification des identifications des raies inconnues dans IRC+10216 : les deux sources présentent des conditions chimiques et d'excitation très différentes, si bien que les intensités relatives des raies dans l'une et l'autre source renseignent sur le type de molécule responsable de l'émission (par exemple les molécules siliciées sont beaucoup plus abondantes, et les molécules oxygénées beaucoup moins abondantes, dans IRC+10216). Cette mini couverture spectrale est également un outil puissant de détermination des densités projetées et des températures rotationnelles des molécules présentant des raies suffisamment nombreuses et fortes pour mener le type d'analyse exposée ci-dessus dans le cas d'IRC+10216.

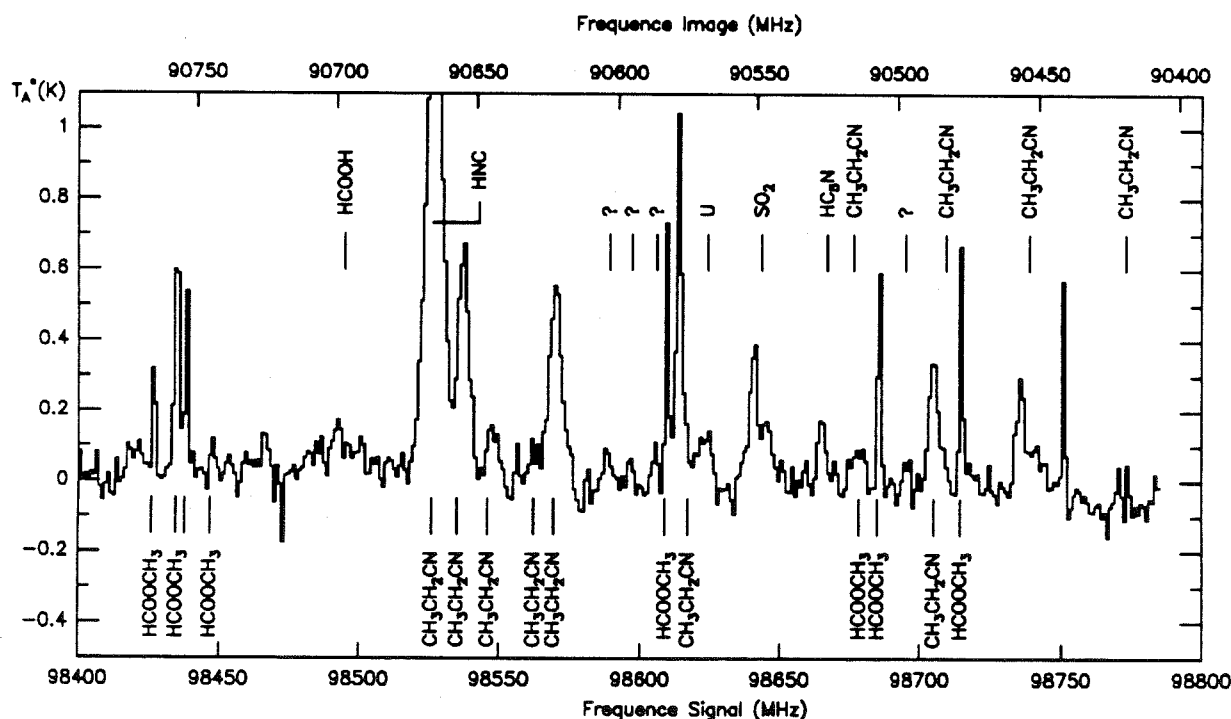


Figure II.16 : Un exemple de spectre à 3mm, observé en mode double bande dans le nuage interstellaire OrionA, avec le télescope de 30m de l'IRAM. Les raies de la bande signal sont signalées sous le spectre, celle de la bande image au-dessus. Les raies "U" sont non identifiées; celle signalées par "?" sont douteuses.

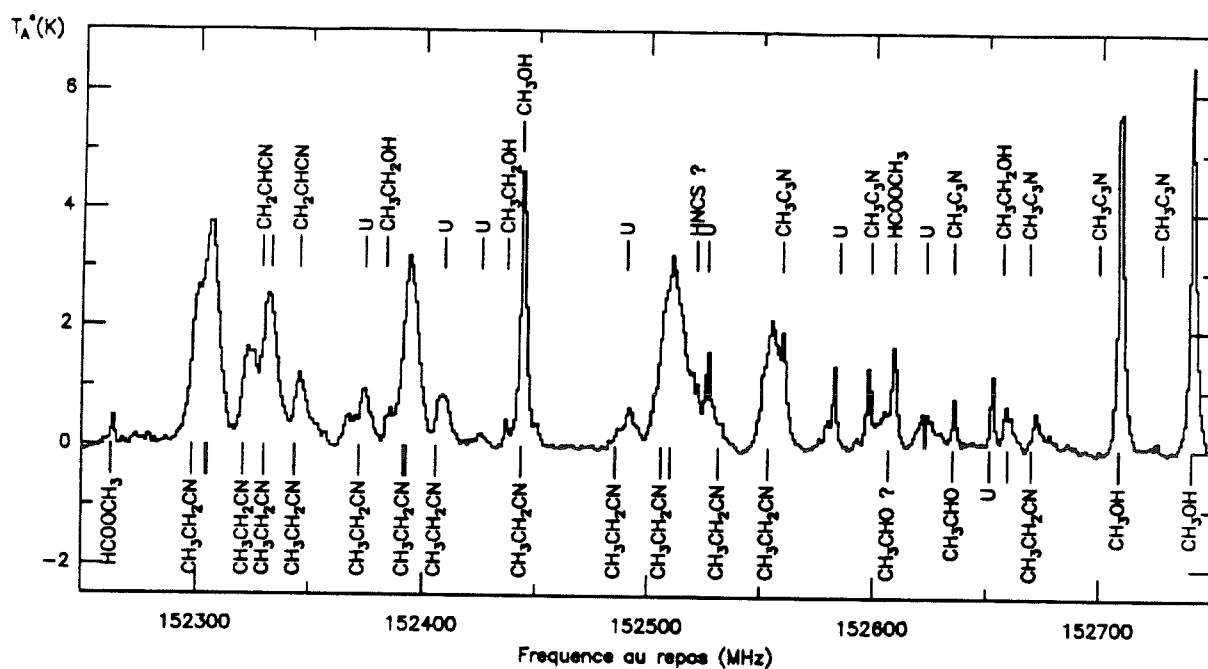


Figure II.17 : Un exemple de spectre à 2mm, observé en mode simple bande dans le nuage interstellaire OrionA, avec le télescope de 30m de l'IRAM. La limite de confusion semble atteinte : la densité des raies est telle qu'il devient difficile de situer le niveau de la ligne de base. Les raies "U" sont non identifiées; l'identification signalée par "?" est douteuse.

IV. DETECTION ET IDENTIFICATION DE NOUVELLES MOLECULES

A. Détection des isotopes ^{13}C de C_3H_2 et de CH_3NC

Les deux articles qui suivent relatent la détection de trois nouvelles molécules (deux isotopes et un isomère d'espèces déjà détectées dans l'espace interstellaire) dans le nuage moléculaire géant SgrB2. Dans l'un et l'autre cas les fréquences des raies moléculaires recherchées étaient bien connues, grâce à des mesures de laboratoire, et la seule difficulté résidait éventuellement dans le choix de la source et des transitions à observer.

1. Les isotopes de C_3H_2

C_3H_2 est la première molécule cyclique détectée dans l'espace interstellaire (Thaddeus *et al*, 1985b). Elle présente un axe de symétrie, si bien que ses isotopes ^{13}C une fois substitués existent sous deux configurations, symétrique et antisymétrique (voir la **Figure II.18**). En outre, la configuration symétrique existe elle-même sous deux formes, la forme ortho, où les spins nucléaires des deux atomes H sont parallèles, et la forme para, où les deux spins sont anti-parallèles.

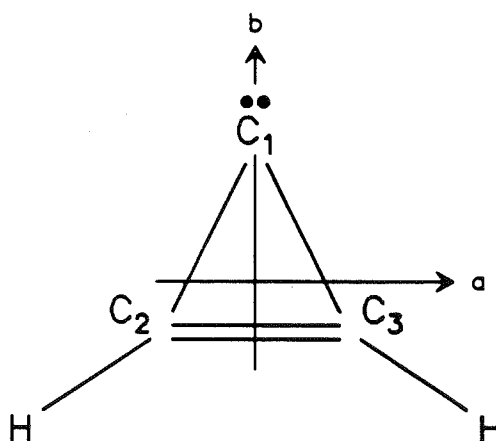


Figure II.18 : La géométrie de la molécule cyclique C_3H_2 (d'après Thaddeus *et al*, 1985b). L' isotope ^{13}C symétrique est obtenu par substitution du ^{12}C en position C_1 , alors que la substitution des atomes C_2 ou C_3 donne l' isotope antisymétrique.

Pour mener à bien la recherche des isotopes ^{13}C de C_3H_2 , nous avons simplement choisi comme source moléculaire SgrB2, la source dans laquelle l'isotope principal avait récemment été identifié, et dans laquelle il présentait les transitions les plus intenses (Thaddeus *et al*, 1985b; Matthews et Irvine, 1985). Le choix des transitions à observer était également simple: pour l'isotope ^{13}C symétrique, les raies les plus intenses proviendraient de l'espèce ortho et pour l'un et l'autre des deux isotopes ^{13}C , symétrique et antisymétrique, les transitions issues de niveaux rotationnels peu élevés seraient plus favorables. En outre, pour que la détection d'une raie à la fréquence attendue ne puisse pas être imputée à une coïncidence de fréquence avec une transition d'une autre espèce, nous avons choisi d'observer deux transitions de chaque isotope (symétrique et asymétrique). Les observations ont été réalisées avec l'antenne de 30m de l'IRAM et leur résultat est présenté dans l'article qui suit. Nous avons détecté trois des quatre raies cherchées (la dernière ne l'a pas été faute de temps), à des vitesses en bon accord avec celle de l'isotope principal (la structure en vitesse du gaz moléculaire dans la direction de SgrB2 est complexe et de plus certaines transitions sont auto-absorbées, il était donc important de vérifier que les raies des isotopes de C_3H_2 , qui doivent provenir des mêmes couches de gaz moléculaire, avaient bien les mêmes vitesses d'émission). En outre cette détection a permis une estimation du rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans SgrB2. La valeur obtenue, 28 ± 5 , est compatible avec les valeurs faibles (de 20 à 30) généralement mesurées pour ce rapport, dans la direction du centre galactique (Penzias 1980; Langer *et al*, 1984).

Astron. Astrophys. 168, L11-L12 (1986)

Letter to the Editor

ASTRONOMY
AND
ASTROPHYSICSDetection of interstellar ^{13}C isotopes of C_3H_2 J. Gómez-González^{1,2}, M. Guélin¹, J. Cernicharo³, C. Kahane³, and M. Bogey⁴¹ IRAM, Domaine Universitaire de Grenoble, Voie 10, F-38406 St. Martin d'Heres, France and Av. Divina Pastora 7, Granada, Spain² Centro Astronomico de Yebes, OAN, Apartado 148, E-19080 Guadalajara, Spain³ Groupe d'Astrophysique, Observatoire de Grenoble, Université Scientifique Technologique et Médicale de Grenoble, CERMO, BP68, F-38402 St. Martin d'Heres Cedex, France⁴ Université de Lille I, Laboratoire de Spectroscopie Hertzienne, F-59655 Villeneuve d'Ascq, France

Received July 15, accepted September 18, 1986

SUMMARY

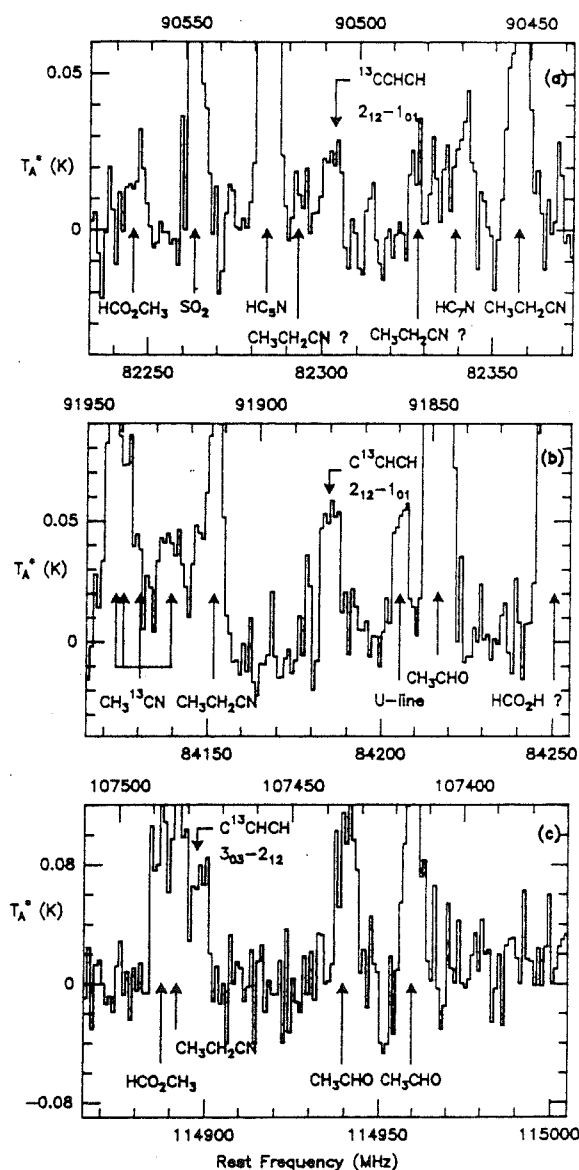
We report the detection of the two ^{13}C isotopes of C_3H_2 in the molecular source SgrB2(OH). The $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic abundance ratio for this ring molecule is found to be ≈ 28 .

keywords: molecules - stars: circumstellar matter

Cyclopropenylidene, C_3H_2 , is a reactive species which has been detected in space prior to its rotational spectrum being observed in the laboratory (Thaddeus, Guélin and Linke 1981; Matthews and Irvine 1985; Thaddeus, Vrtilek and Gottlieb 1985). Observed in about every dense molecular cloud, it is the only ring molecule known to be abundant in interstellar clouds; although little has been speculated on its role in interstellar chemistry, there is no doubt that it will become one of the key species to test the carbon chemistry models. In this Letter, we report the first detection in space of its rare isotopic species $^{13}\text{CC}_2\text{H}_2$ and C^{13}CHCH .

The microwave spectrum of the two singly-substituted ^{13}C isotopes of C_3H_2 has been studied in the laboratory by Bogey and Destombes (1986) and the frequencies of these species' rotational transitions are precisely known. The symmetrical isotope ($^{13}\text{CC}_2\text{H}_2$), just as formaldehyde and the main ^{12}C isotope of C_3H_2 (see Thaddeus, Vrtilek and Gottlieb 1985), presents an ortho-para level segregation, due to the presence of two indiscernible H atoms. The asymmetrical ^{13}C isotope of C_3H_2 has no ortho/para level segregation and no enhanced transitions. This lack is however more than compensated by a twice larger abundance (the asymmetrical isotope can be formed by substituting any of the two off-axis C atoms of C_3H_2), so that this isotope is in fact the easiest to detect.

Due to a high dipole moment, which makes radiative cooling very efficient, the apparent rotational temperature of the main C_3H_2 isotope is low in most molecular clouds ($< 15\text{K}$, according to Thaddeus, Vrtilek and Gottlieb 1985), and the strongest lines are those which arise from the lowest ortho transitions: namely, in the 3mm band, the $2_{12}+1_{01}$ transition at 85339 MHz (Thaddeus, Guélin and Linke 1981) and, to a lesser degree, the $3_{12}+3_{03}$ transition at 82966 MHz (another strong ortho line, the $3_{03}+2_{12}$ transition, falls at 117 GHz and is not observable from the ground; the $4_{12}+4_{21}$ line, at 85656 MHz, lies already too high in energy--



The lines of the ^{13}C isotopes of C_3H_2 detected in SgrB2(OH) with the IRAM 30-m telescope. The spectral resolution is 1 MHz. The upper and lower frequency scales correspond to upper and lower sidebands and assume a source LSR velocity of 60 km/s.

L12

TABLE 1: LINE PARAMETERS

Isotope	Transition ($J_{K-1K+1} \rightarrow J_{K+1K+1}$) _{u+1}	Frequency* (MHz)	S	E/k (K)	Ta* (K)	Ta·Δv (K·ms ⁻¹)	V _{LSR} (kms ⁻¹)	FWPW (kms ⁻¹)
MAIN	2 _{0,2} →1 _{1,1}	82093.6	1.4 ^{\$}	6.4	0.6	5.80(0.4)	58(2)	15(2)
SYM	2 _{1,2} →1 _{0,1}	82303.7	1.5 ^{\$}	6.3	0.035	0.67(0.1)	62(2)	18(3)
ASYM	2 _{1,2} →1 _{0,1}	84185.6	1.5	6.3	0.05	0.87(0.1)	61(2)	16(2)
ASYM	3 _{0,3} →2 _{1,2}	114897.4	2.4	11.9	0.07	0.9 (0.2)	58(3)	18(5)

Notes to the table:

- + rest frequencies are from Bogey and Destombes (1986);
- \$ for calculating the line intensities of the symmetrical species, S, the transition strength, has to be multiplied by statistical weight factors (1/2 for the 2_{0,2}→1_{1,1} transition and 3/2 for the 2_{1,2}→1_{0,1} one);
- E/k is the energy in Kelvins of the upper level.
- the numbers in parenthesis are one r. m. s. deviation.

see Cummins, Linke and Thaddeus 1986). The 2_{1,2}→1_{0,1} transition and the 3_{0,3}→2_{1,2} one, which is now shifted at 114 GHz, should be the most favorable for detecting the symmetrical ¹³C isotope in the 3mm band. The same transitions should also be the best ones for detecting the asymmetrical isotope.

We have searched for these 4 transitions in SgrB2(OH), the molecular source where the 2_{1,2}→1_{0,1} line of the main isotope, although self-absorbed, has the largest integrated intensity (Guélin and Thaddeus, unpublished data). Three lines were detected with roughly the expected relative intensity; they are presented in Fig. 1. We lacked us unfortunately to derive for the fourth line, the weakest, a significant spectrum.

The observations were carried out with the IRAM 30m telescope, at Pico Veleta, Spain. The observing procedure and antenna characteristics were the same than in Guélin et al. (1986). Although the calibration of the spectra was checked by observing the strong lines falling in the IF band with the help of a Fabry-Perot SSB filter, the actual observations were made without filter, in double-sideband mode, to insure lower noise and flatter baselines (a procedure which unfortunately increased the already severe problem of line confusion). The sideband of each of the features of Fig 1 has been checked by changing the LO frequency.

A result of our observations has been the unexpectedly large intensity and the reduced width of most lines observed with the 30m telescope. Although the bulk of molecular emission in SgrB2 is known to be spread over a source several minutes of arc wide, a fair fraction of the molecular gas is actually constrained in a clump of small angular size and low velocity dispersion, located in the direction of the OH maser. The emission from this clump is diluted in the low angular resolution observations made with the 7m Bell Laboratories antenna (Cummins et al. 1986), but dominates the broad emission from the surrounding clouds (at least for optically thin lines) in the 30m telescope data. The enhancement and narrowing of the lines offers the possibility, using a large telescope, to lower the detection limit in this uniquely rich molecular source of the galactic centre region.

The strongest of the 3 observed lines is, as expected, the 2_{1,2}→1_{0,1} transition of the asymmetrical isotope, C¹³CHCH. This line (Fig 1b) lies in a clean region of the spectrum and is apparently free of confusion. Its rest velocity is 61±2 kms⁻¹, in good agreement with the velocity of the main isotope lines, 60 kms⁻¹ according to our data (see also Cummins et

al. 1986, Hollis et al. 1983 -- we discard in that comparison the line at 85339 GHz which is heavily self-absorbed); its width is 16±2 kms⁻¹. The 3_{0,3}→2_{1,2} transition of the same isotope (Fig. 1c) is contiguous to another spectral line and its parameters are more difficult to measure; within the uncertainties, it has however the same velocity, width and intensity than the line of Fig. 1b. The third line, the 2_{1,2}→1_{0,1} transition of the symmetrical ¹³C isotope (Fig. 1a), is ≈1.5 times weaker than its asymmetrical counterpart, but has about the same velocity and width (see Table 1).

Taken separately, the detections of each ¹³C isotope can only be dubbed as tentative, in view of the wealth of SgrB2 in molecular lines. Together, they make however a strong case. It would indeed be hard to argue that one ¹³C isotope could be present without the other or that their abundance ratio may differ much from 2. Our identifications rely thus on three lines with the right frequency and width and with consistent intensities: they are very unlikely to be the result of chance coincidences.

Our detection of ¹³C C₂H₂ allows us to make a crude estimate of the C₂H₂ ¹²C/¹³C isotopic abundance ratio in the 60 kms⁻¹ cloud of SgrB2. Assuming a single rotation temperature for all isotopes, we calculate a value of 28±5. Clearly, more observations would be needed to determine accurately this ratio, as well as to derive the abundance ratios between the two ¹³C isotopes or between the ortho and para symmetric species. At most can we say from our data that the two latter ratios are consistent with their LTE values of 2 and 3.

REFERENCES

- Bogey, M. and Destombes, J.L.: 1986, *Astron. Astrophys.* **159**, L8.
 Cummins, S.E., Linke, R.A. and Thaddeus, P.: *Ap. J. (Supplement)* **60**, 819.
 Guélin, M., Cernicharo, J., Kahane, C. and Gómez-González, J.: 1986, *Astron. Astrophys.* **157**, L17.
 Hollis, J.M., Suenram, R.D., Lovas, F.J. and Snyder, L.E.: 1983, *Astron. Astrophys.* **126**, 393.
 Matthews, H.E. and Irvine, W.M.: 1985, *Ap. J. (Letters)* **298**, L61.
 Thaddeus, P., Guélin, M. and Linke, R.A.: 1981, *Ap. J. (Letters)* **246**, L41.
 Thaddeus, P., Vrtilik, J.M. and Gottlieb, C.A.: 1985, *Ap. J. (Letters)* **299**, L63.

2. La détection de CH_3NC

CH_3CN est une toupie symétrique, qui a été détectée pour la première fois dans l'espace interstellaire en 1971, par Solomon *et al.*, dans SgrB2. Son isomère CH_3NC avait été cherché sans succès, notamment par Irvine et Schoerb (1984) dans le nuage sombre TMC1. Or les abondances relatives des deux isomères représentent un test intéressant des modèles de formation de ces molécules. Nous avons donc entrepris une recherche de CH_3NC dans SgrB2, source de caractéristiques chimiques différentes et où l'isotope principal est plus abondant. Ce nuage possède l'inconvénient de présenter des spectres moléculaires très riches et des formes de raies complexes, si bien que les risques de coïncidence accidentelle avec une raie d'une autre molécule sont importants et il est absolument indispensable d'observer plusieurs transitions d'une même espèce, pour pouvoir conclure à sa détection. Nous avons recherché, avec l'antenne de 30m de l'IRAM au Pico Veleta, 3 raies de rotation de CH_3NC ($J=4-3$, $J=5-4$, et $J=7-6$). Il est à noter que les raies de rotation de cette molécule, qui est, comme CH_3CN , une toupie symétrique, sont en fait des multiplets. Cette structure "en K" est assez difficilement résolue dans une source comme SgrB2, où les raies sont très larges, mais elle se traduit cependant par un élargissement bien visible des raies, qui signe de façon assez sûre l'identification de la molécule. Des trois raies observées (voir l'article qui suit) nous avons pu conclure à la détection de CH_3NC dans Sgr2 et nous avons même déduit une estimation de l'abondance relative de cette molécule par rapport à l'isotope principal CH_3CN . Cette mesure est assez incertaine, car il n'est pas impossible que les raies de CH_3NC se superposent à celles d'autres molécules. Cependant, la valeur obtenue, ($[\text{CH}_3\text{NC}]/[\text{CH}_3\text{CN}] \approx 0.03 - 0.05$), est assez sensiblement inférieure à la valeur ~ 0.15 prédite par les modèles standards de chimie en phase gazeuse (DeFrees *et al.*, 1985).

Letter to the Editor

Tentative detection of CH_3NC towards Sgr B2J. Cernicharo^{1,2}, C. Kahane², M. Guélin¹, and J. Gomez-Gonzalez³¹ IRAM, Domaine Universitaire de Grenoble, Voie 10, F-38406 St. Martin d'Heres, France² Groupe d'Astrophysique de l'Observatoire de Grenoble, USTMG, CERMO, BP 68, F-38402 St. Martin d'Heres Cedex, France³ Centro Astronomico de Yebes, OAN, Apartado 148, Guadalajara, Spain

Received August 27, accepted September 16, 1987

Summary.

We report the detection in Sgr B2 of three millimetre lines at the frequencies of the $J=4\rightarrow3$, $J=5\rightarrow4$, and $J=7\rightarrow6$ transitions of methyl isocyanide. If these lines arise from CH_3NC , the $\text{CH}_3\text{NC}/\text{CH}_3\text{CN}$ abundance ratio is ≈ 0.05 . The frequency of the $J=5\rightarrow4$ line is close to that of the $J=4\rightarrow3$ transition of NaOH . However, we don't find any signal at the expected frequencies of the $J=3\rightarrow2$, $J=5\rightarrow4$, and $J=6\rightarrow5$ transitions of NaOH ($T_A \leq 0.07\text{K}$).

Keywords: molecules: lines - identification; interstellar medium: abundances.

The observation of chemically related isomers in interstellar clouds provides a crucial test of molecule formation schemes (e.g. DeFrees, 1987). Current models of gas phase chemistry in dense clouds (e.g. DeFrees et al. 1985) predict sizable abundances for the metastable isomers of HCN and CH_3CN , HNC and CH_3NC . So far, however, only HNC was detected. The weak spectral feature in TMC1, tentatively identified by Irvine and Schloerb with the $1_0 \rightarrow 0_0$ line of CH_3NC , was shown by Matthews and Sears (1986) to be spurious. Matthews and Sears derive an upper limit to the $\text{CH}_3\text{NC}/\text{CH}_3\text{CN}$ abundance ratio (0.05) which is 30 times smaller than HNC/HCN (Irvine and Schloerb 1984) and a factor of three smaller than the theoretical estimate of DeFrees et al. (1985). CH_3CN , however, is not very abundant in TMC1, and it was interesting to check whether the limit of 0.05 could be lowered, or CH_3NC be detected, in sources with different chemical characteristics. We report here the detection in Sgr B2 of three broadened lines which we identify with the $J=4\rightarrow3$ through $7\rightarrow6$ rotational transitions of CH_3NC .

The observations were made in May, August, and October 1986, and in March 1987 with the IRAM 30-m telescope at Pico Veleta, Spain. The telescope was equipped with 2 and 3-mm SIS receivers with DSB noise temperatures of 150 and 100 K. The pointing and focus were checked every two hours against the radio continuum sources Sgr B2(M), NRAO150 and 3C84. A 512 x 1 MHz channel spectrometer provided a velocity resolution of $\approx 3\text{ km s}^{-1}$ at 3 mm, and $\approx 2\text{ km s}^{-1}$ at 2 mm. Figure 1 shows the spectra observed in Sgr B2(OH) (1950 RA = $17^{\text{h}}44^{\text{m}}11^{\text{s}}$, Dec = $-28^{\circ}22'30''$) at the frequencies of the $J=4\rightarrow3$, $J=5\rightarrow4$, and $J=7\rightarrow6$ lines of CH_3NC , and Figure 2 shows a spectrum centered on the $5\rightarrow4$ line of $\text{CH}_3^{13}\text{CN}$. Figure 1a,b and Figure 2 were observed in the DSB mode, Figure 1c with a 12 dB rejection of the upper side band. The ordinate on both figures is T_A , the effective SSB antenna temperature above the atmosphere. The abscissa is rest frequency, for a source LSR velocity of 60 km s^{-1} for Figure 1 and 57 km s^{-1} for Figure 2. Main beam brightness temperature can be obtained from the antenna temperatures through the relation $T_B \approx T_A/0.6$.

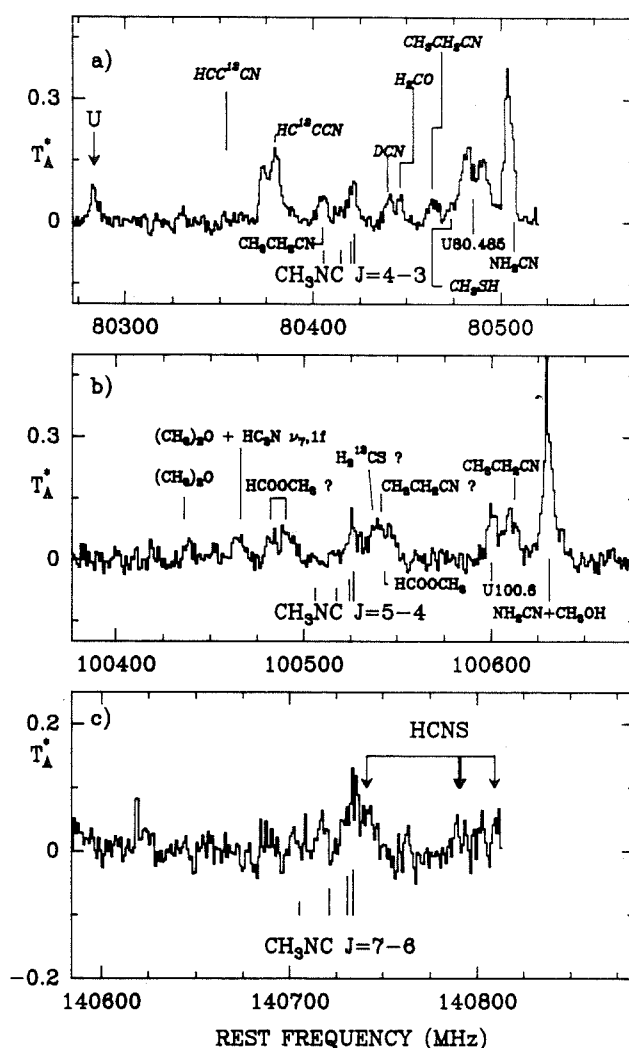


Figure 1. $J=4\rightarrow3$, $J=5\rightarrow4$, and $J=7\rightarrow6$ transitions of CH_3NC observed towards Sgr B2(OH) with the IRAM 30-m telescope. The expected positions of the $K=0,1,2$, and 3 components of these transitions are indicated by vertical lines. The spectral resolution is 1 MHz. Lines in the image sideband are labelled in italics. The frequency scale is for a source LSR velocity of 60 km s^{-1} . Ordinate is antenna temperature, corrected for the atmosphere.

Send offprint requests to: J. Cernicharo

L2

The large density of spectral lines on Figure 1 and 2 makes difficult the identification of weak features. There is however compelling evidence that the three features at the centre of Figure 1 arise from CH_3NC . Firstly, for a source LSR velocity of $58\text{--}60\text{ km s}^{-1}$ equal to that derived from the CH_3CN and $\text{CH}_3^{13}\text{CN}$ lines (Table 1), the observed line peaks coincide in frequency with the $K=0$ and $K=1$ components of the CH_3NC rotational transitions. Secondly, these features have no plausible alternative assignment; yet, few lines remain unidentified in Figure 1 and 2. The $22(8,15)\text{--}23(7,16)$ transition of $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$, which relates two levels of energy 170 K has a rest frequency of 140733 MHz , very close to the $J=7\text{--}6$, $K=0$ transition of CH_3NC (140734 MHz); ethyl cyanide is however unobserved in Sgr B2 and we couldn't detect in this source any transition with similar energy levels. We did not search for the $J=8\text{--}7$ transition of CH_3NC , the highest transition we could reach with our present SIS receivers, since it is blended with the strong and broad $10(0,10)\text{--}9(1,9)$ line of SO_2 .

The broad (30-MHz wide) feature adjacent to the line we identify with CH_3NC $J=5\text{--}4$ (Figure 1b) was first detected by Hollis and Rhodes (1982). These authors assigned it to the $J=4\text{--}3$ transition of NaOH and suggested, to explain its peculiar shape, that it is self-absorbed. This assignment appears incorrect since we could not detect the NaOH $J=3\text{--}2$ and $6\text{--}5$ rotational transitions down to a 3σ level of 0.07 K (a similar upper limit on the $J=5\text{--}4$ line intensity comes from Cummins et al. (1986) spectral survey). Hollis and Rhodes's feature on Figure 1 can be resolved into three partially blended lines: the $J=5\text{--}4$ CH_3NC line at 100525 MHz , the $3(1,2)\text{--}2(1,2)$ H_2^{13}CS line at 100535 MHz , and a line at $\approx 100542\text{ MHz}$, which might be HCOOCH_3 $12(1,11)\text{--}12(1,12)$ or $\text{H}_62\sigma$, but which does not agree in frequency with NaOH (100529 MHz).

The $\text{CH}_3\text{NC}/\text{CH}_3\text{CN}$ abundance ratio, R , can be derived from the data of Figures 1 and 2. The intensity ratio derived by comparing the intensity of the blended $J=5\text{--}4$, $K=0$ and $K=1$ lines of CH_3CN to the average intensity of the $J=4\text{--}3$ and $5\text{--}4$, $K=0$ and 1 lines of CH_3NC is ≈ 0.05 . This ratio, strictly speaking, is an upper limit to the abundance ratio, R , as the CH_3CN line might be optically thick and the lines assigned to CH_3NC , conceivably, could still arise from unrelated molecules. As far as optical thickness is concerned, there are good reasons to believe that the CH_3CN line opacity is not large. The excitation temperature of the CH_3CN $5\text{--}4$ line ($\geq 20\text{ K}$ according to Cummins et al. 1983) is large with respect to the observed line brightness temperature ($\approx 1.8\text{ K}$ above the continuum background). Moreover, our line intensity is not much different from that observed by Cummins et al. with a 20 times poorer resolution, so that clumpiness does not seem to affect Cummins et al.'s calculations, at least for the lowest K components. The $5\text{--}4$ transition lies high enough that strong absorption by cool foreground material seems unlikely. Finally, the $\text{CH}_3^{12}\text{CN}$ to $\text{CH}_3^{13}\text{CN}$ line intensity ratio we observe (≈ 15) is close to the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic ratio observed in Sgr B2 for many other molecules (e.g. Penzias, 1980). Since the dipole moments of CH_3NC and CH_3CN are about equal (3.89 and 3.93 D respectively, Römheld, 1978), we conclude that $R \leq 0.05$ and, probably, $R \approx 0.03\text{--}0.05$.

The HNC/HCN abundance ratio in Sgr B2 cannot be derived from these species' abundant isotopes, since their lines are optically very thick. Cummins, Linke and Thaddeus (1986) have observed the $1\text{--}0$ lines of the rare isotopes H^{13}CN , HN^{13}C

Table 1. Observed⁺ line parameters for CH_3NC , CH_3CN , and $\text{CH}_3^{13}\text{CN}$

Transition	$V_{\text{LSR}}(\text{km s}^{-1})$	$\Delta v(\text{km s}^{-1})$	$T_A dv$
CH_3NC $J=4\text{--}3$	60 ± 2.0	22.2 ± 2	2.7 ± 0.3
CH_3NC $J=5\text{--}4$	60 ± 1.5	19.7 ± 3	1.8 ± 0.2
CH_3NC $J=7\text{--}6$	58 ± 3.0	19.5 ± 2	1.9 ± 0.3
CH_3CN $J=5\text{--}4$	60 ± 2.0	27.0 ± 3	36.7 ± 2.0
$\text{CH}_3^{13}\text{CN}$ $J=5\text{--}4$	57 ± 3.0	21.8 ± 2	2.4 ± 0.3

⁺ Gaussian fit to the $K=0$ and $K=1$ components

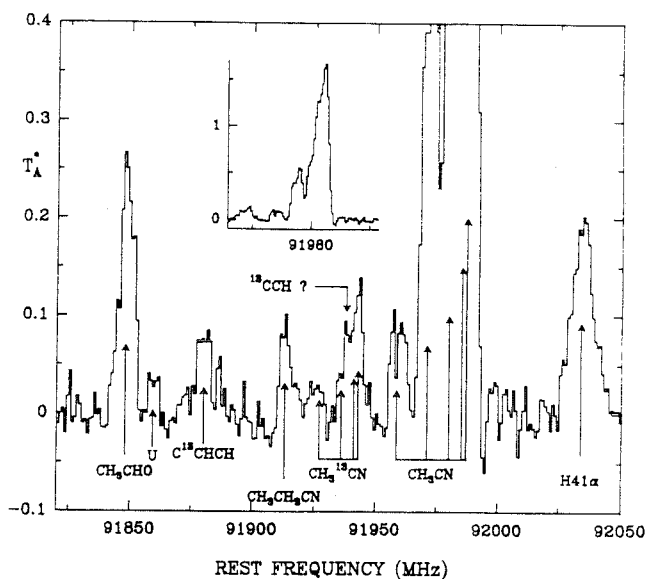


Figure 2. $J=5\text{--}4$ ($K=0,1,2,3,4$) lines of CH_3CN and $\text{CH}_3^{13}\text{CN}$. The frequency and ordinate scales are as in Figure 1. The arrows indicating the position of the $\text{CH}_3^{13}\text{CN}$ lines are for an assumed LSR velocity of 57 km s^{-1} .

and HC^{15}N , and set an upper limit to the H^{15}NC line intensity. Their data yield a $\text{HN}^{13}\text{C}/\text{H}^{13}\text{CN}$ intensity ratio of 0.4 ± 0.08 , which is only an upper limit to the HNC/HCN abundance ratio, since the H^{13}CN line is optically thick (the dipole moments of these two species are about equal). The upper limit to HNC/HCN which can be derived from H^{15}NC and HC^{15}N is somewhat higher. The detection of H^{15}NC would be needed in order to measure properly the HNC/HCN abundance ratio. From the available data, however, it seems likely that HNC/HCN is larger than $\text{CH}_3\text{NC}/\text{CH}_3\text{CN}$.

In the ion-molecule schemes, CH_3NC , CH_3CN , HNC and HCN are formed from the dissociative recombination of their protonated ions, CH_3NCH^+ , CH_3CNH^+ , and HCNH^+ . However, whereas HNC and HCN have a common ion precursor, their methyl analogs form from different ions, since the CH_3CNH^+ and CH_3NCH^+ backbone structures are unlikely to isomerize during the recombination process (Green and Herbst 1979). Though CH_3CNH^+ and CH_3NCH^+ probably have a common origin, both resulting from the radiative association of CH_3^+ with HCN (DeFrees et al. 1985), the isomerization of HCN and CH_3CN follow different paths and the HNC/HCN and $\text{CH}_3\text{NC}/\text{CH}_3\text{CN}$ ratios are expected to be different.

We have also tried to observe the $J=4\text{--}3$, $J=5\text{--}4$, and $J=8\text{--}7$ lines of methyl isocyanide towards the molecular envelope of the carbon star IRC+10216. We obtain an upper limit of 0.03 K for the emission of CH_3NC , and an abundance ratio $\text{CH}_3\text{NC}/\text{CH}_3\text{CN} \leq 0.1$.

References

- Cummins, S.E., Green S., Thaddeus, P., Linke, R.A.: 1983, *Ap. J.*, **266**, 331.
- Cummins, S.E., Linke, R.A., Thaddeus, P.: 1986, *Ap. J., Suppl. Series* **60**, 819.
- DeFrees, D.J.: 1987, in *IAU Symp 120*, ed. S.P. Tarafdar, Reidel, Dordrecht, p. 203.
- DeFrees, D.J., McLean, A.D., Herbst, E.: 1985, *Ap. J.*, **293**, 236.
- Green S., Herbst E.: 1979, *Ap. J.*, **229**, 121.
- Hollis, J.M., Rhodes, P.J.: 1982, *Ap. J., Letters*, **262**, L1.
- Irvine, W.M., Schloerb, F.P.: 1984, *Ap. J.*, **282**, 516.
- Matthews, H.E., Sears, T.J.: 1986, *Ap. J.*, **300**, 766.
- Römheld, M.: 1978, Ph. D. Dissertation, Ulm.

B. Détection des isotopes $^{29}\text{SiCC}$ et $^{30}\text{SiCC}$

Contrairement aux deux cas précédents, il n'existait pas pour les isotopes de SiCC de valeurs mesurées au laboratoire des fréquences des raies de rotation. D'ailleurs, les fréquences des transitions rotationnelles de l'isotope principal lui-même n'ont été précisément déterminées que grâce aux observations astronomiques de cette molécule (Thaddeus *et al*, 1984), très instable dans les conditions terrestres. En effet, les mesures au laboratoire des constantes rotationnelles reposaient, jusque très récemment, sur des observations optiques (Michalopoulos *et al.*, 1984) et différaient d'environ 3% des valeurs, beaucoup plus précises, déduites des raies de rotation interstellaires, observées dans le domaine millimétrique. De très récentes observations, au laboratoire, du spectre microonde de la molécule (Gottlieb *et al*, 1989) fournissent des constantes moléculaires en excellent accord avec les valeurs déterminées grâce aux observations astronomiques.

Ainsi que nous l'avons exposé au chapitre précédent, il est aisé de déduire, au moins approximativement, les constantes rotationnelles d'un isotope rare, de celles de l'isotope principal. La principale difficulté provient de l'estimation des corrections d'énergie résiduelle de vibration. SiCC est une molécule symétrique, si bien que les substitutions isotopiques de l'atome de silicium ne font que déplacer le centre de gravité le long de l'axe de symétrie de la molécule. La méthode de détermination des constantes de rotation effectives des isotopes $^{29}\text{SiCC}$ et $^{30}\text{SiCC}$ à partir de celles de $^{28}\text{SiCC}$ est décrite dans l'article qui suit. Elle fournit des valeurs assez précises ainsi que nous avons pu le vérifier, a priori en effectuant le même calcul pour les isotopes d'une molécule de géométrie très analogue, SO_2 , a posteriori en recalculant les constantes rotationnelles des isotopes de SiCC à partir des fréquences des transitions que nous avons observées.

Nous avons cherché et détecté, avec le radiotélescope de 30m de l'IRAM, les isotopes de SiCC dans l'enveloppe circumstellaire IRC+10216. C'est une des très rares sources dans lesquelles l'isotope principal a été détecté jusqu'à présent. Elle offre, en outre, l'avantage de présenter des raies à flancs abrupts, qui facilitent la détection des raies faibles et enfin, le risque de confusion et de recouvrement accidentel de plusieurs raies moléculaires y est relativement limité. De la détection de trois raies de chaque isotope, nous avons pu déduire les constantes rotationnelles effectives de chaque espèce, qui se sont avérées prédites à mieux que 10^{-5} près par nos calculs (Cernicharo, 1988).

Les rapports isotopiques du silicium, déduits des intensités des raies des trois substitués isotopiques (^{28}Si , ^{29}Si et ^{30}Si), sont très voisins des rapports terrestres, ce qui est en accord avec les modèles de nucléosynthèse qui prédisent que les isotopes rares du silicium sont formés lors des phases explosives d'étoiles très massives; leurs abondances relatives ne sont donc pas modifiées par les processus nucléaires qui intéressent une géante rouge froide comme IRC+10216 (nous aurons l'occasion de revenir sur ces questions dans la deuxième partie de ce travail).

Letter to the Editor

Detection of $^{29}\text{SiC}_2$ and $^{30}\text{SiC}_2$ toward IRC + 10216J. Cernicharo^{1,2}, C. Kahane¹, J. Gómez-González^{2,3}, and M. Guélin²¹ Groupe d'Astrophysique, Université de Grenoble, CERMO, BP68, F-38402 St. Martin d'Hères Cedex, France² IRAM, Domaine Universitaire de Grenoble, Voie 10, F-38406 St. Martin d'Hères, France, and Av. Divina Pastora 7, Granada, Spain³ Centro Astronómico de Yebes, OAN, Apartado 148, E-19080 Guadalajara, Spain

Received June 12, accepted July 16, 1986

SUMMARY

Six new lines in the millimetre spectrum of IRC+10216 have been observed at the frequencies predicted for the $4_{04} + 3_{03}$, $4_{22} + 3_{22}$, and $4_{22} + 3_{21}$ transitions of $^{29}\text{SiC}_2$ and $^{30}\text{SiC}_2$. The predictions are based on the geometrical structure of SiC_2 derived by Thaddeus et al. (1984). Our result definitely confirms the identification of this species in IRC+10216. We find abundance ratios between the three silicon isotopes which are very close to the terrestrial elemental isotopic ratios.

Keywords: molecules-stars: circumstellar matter.

Kleman (1956) has shown that the blue-green bands observed in the stellar atmospheres of carbon-rich stars can be assigned to the electronic absorption spectrum of a molecule containing silicon and carbon. He postulated as best carrier of these bands the SiC_2 radical. For long, SiC_2 has been assumed linear by analogy with C_2 . However, Michalopoulos et al. (1984), from optical spectroscopy of jet-cooled SiC_2 , and Grev and Schaeffer III (1984), from ab-initio calculations, have shown that the most stable structure of SiC_2 is actually triangular. Recently, Thaddeus, Cummings and Linke (1984) have assigned 9 lines of the millimetre spectrum of IRC+10216 to rotational transitions of the abundant isotope $^{28}\text{Si}^{12}\text{C}_2$. The basis for this assignment was, first, the excellent fit to the astronomical frequencies by an asymmetrical top molecule with rotational constants similar to those observed by Michalopoulos et al (1984) and, second, the lack of observable transitions from levels with odd K numbers, which implied a C_{2v} symmetry. Whereas the quality of the fit left no doubt that the 9 lines arose from a single molecule with an XY_2 structure (see e.g. Snyder et al., 1985), the identity of the molecule was not definitely established: the SiC_2 rotational constants derived in the optical laboratory were 3% larger than the astronomical ones, a difference at the limit of the measurement uncertainty. In view of the difficulty of observing a species like SiC_2 by microwave laboratory techniques, the best way to confirm the identification was to observe isotopic substitutes in space. In this Letter, we report the detection of the rare isotopic species $^{29}\text{Si}^{12}\text{C}_2$ and $^{30}\text{Si}^{12}\text{C}_2$, and the marginal detection of $^{28}\text{Si}^{13}\text{C}^{12}\text{C}$.

No laboratory determination, even crude, exists for the rotational constants of the rare SiC_2 isotopes. Yet, these constants are not unknown, as they can be

derived from the geometrical structure of the main isotope. The calculated values should be quite accurate in the case of silicon substitution, since this simply shifts the molecule's center of gravity along the symmetry axis (a).

From the expression of the equilibrium inertia moments for an XY_2 molecule (see Gordy and Cook 1970, p. 502), we can write for its $\text{X}'\text{Y}_2$ substitute:

$$A'_e = A_e \quad (1)$$

$$B'_e = \rho B_e \quad (2)$$

$$C'_e = \rho A_e B_e \times (A_e + \rho B_e)^{-1} \quad (3)$$

where $\rho = m_X M' / m_X M$, $M = m_X + 2m_Y$ and $M' = m_{X'} + 2m_Y$.

Relations (1)-(3) strictly apply only to the equilibrium constants A'_e , B'_e and C'_e . In a slightly modified form, however, they can provide fairly accurate estimates of the effective constants A'_0 , B'_0 and C'_0 . These latter are indeed linked to the equilibrium constants through relations of the form:

$$B_0 = B_e - \alpha^b$$

where $\alpha^a, \alpha^b, \alpha^c = \sum \alpha_i^a, \alpha_i^b, \alpha_i^c$, and where the α_i are the vibration-rotation constants associated with the normal vibrational modes. The dependence of the α_i on ρ is rather involved (see e.g. Darling and Dennison 1940) and ranges from ρ^0 for the bending constant α_2^a , to $\rho^{3/2}$ for the constant associated with symmetrical stretching along the X-Y bonds, α_1^b (the dependence of this latter on ρ is similar to that in a diatomic molecule). Altogether, the zero-point vibration correction terms α^a and α^b can roughly be assumed to scale respectively as A and B, so that relations (1) and (2) can be simply re-written:

$$A'_0 = A_0 \quad (4)$$

$$\text{and} \quad B'_0 = \rho B_0 \quad (5)$$

Assuming the same inertial defect for the two isotopic species, the third constant, C'_0 , is readily derived from A_0 and B_0 . We get:

$$C'_0 = \rho C_0 B_0 \times [\rho B_0 + (1-\rho) C_0]^{-1} \quad (6)$$

An estimation of the errors introduced by relations (4)-(6) can be made by comparing the calculated and observed rotation constants for the diatomic and XY_2 molecules studied in the laboratory. Equation (2) is identical to the equation relating the equilibrium

Send offprint requests to: J. Cernicharo

L10

constants in diatomic molecules. For these latter, α varies as $p^{3/2}$ (an extreme case for an XY_2 molecule), and the correct form for relation (5) is $pBo + p(1-p^{1/2})\alpha$. For molecules like SiS, CS, SiO, etc., the correction term $p(1-p^{1/2})\alpha$ is small ($\approx 2 \times 10^{-5}$), so that the dependance of α on p doesn't have to be known exactly. In fact, the use of relations (4)-(6) to XY_2 molecules with known spectroscopic constants (SO_2 , O_3 , C_2H_2 ...), leads to errors on the rotational constants of their $X^{13}Y_2$ isotopic substitutes which are smaller than 2×10^{-5} (see e.g. Table 1). The accuracy of relations (4) to (6) for species like SO_2 is actually well known: it stems from the close similarity between these molecules' substitution and equilibrium structures (see e.g. Gordy and Cook, *ibid*, p. 524).

The rotational constants of $^{29}SiC_2$ and $^{30}SiC_2$, calculated from expressions (4) to (6), are given in the even rows of Table 1. The rotational parameters of $^{29}Si^{13}CC$ cannot be derived from similar simple expressions, since the substitution of an off-axis C atom causes a rotation of the principal axes of inertia. These parameters have to be calculated through diagonalization of the inertia matrix. The computed values are given in Table 1 (line 6); judging from the results of parallel calculations on $S^{17}O^{16}O$ (Table 1, line 12), they should be accurate to a few $\times 10^{-5}$.

TABLE 1

OBSERVED AND EXPECTED ROTATIONAL CONSTANTS (MHz)

MOLECULE	A	B	C
$^{29}SiCC$	52390.0* [52390.0]	12947.1# [12946.6]	10314.0# [10314.8]
$^{30}SiCC$	52390.0* [52390.0]	12752.2# [12751.5]	10189.1# [10190.6]
$^{29}Si^{13}CC$	-- [50381.8]	-- [12687.8]	-- [10185.2]
^{33}SOO	59856.5 [59857.2]	10318.2 [10318.0]	8780.2 [8780.2]
^{34}SOO	58991.2 [58992.5]	10318.4 [10318.0]	8761.4 [8761.4]
$^{32}S^{17}OO$	59883.5 [59885.2]	10008.1 [10007.4]	8555.2 [8554.9]

notes:

The observed values (odd rows) are derived from this paper or taken from Lovas (1978); between brackets (even rows) are given the values estimated from expressions (4) to (6) or from diagonalization of the matrix of inertia (see text).

*) Fixed value.

#) Adopting the distortion constants of Thaddeus et al. for $^{29}SiC_2$ (see text).

main and the rare isotopes are at most a few percent. Transposed to SiC_2 , they lead to an uncertainty in the frequencies of low J-low K rotational transitions which is of the same order as that discussed above for the rotational constants. Altogether, the uncertainties in the predicted frequencies in Table 2 should thus amount to 2-4 MHz.

The observation of the SiC_2 isotopes was made with the IRAM 30 m telescope at Pico Veleta, Spain. The telescope was equipped with 3-mm SIS and 3-mm Schottky receivers with DSB noise temperatures of 100 - 300 K. The observing procedure has been described by Guélin et al. (1986). During most of the observations, the weather was clear and the atmospheric opacity was below 0.1. The pointing was checked every two hours on the quasar 3C273 and found to be accurate within 5", or $\approx 1/5$ of the antenna beamwidth. The line temperatures in Fig. 1 and Table 3 (T_A^*) are effective SSB antenna temperatures above the atmosphere. Each line of Fig. 1 (as well as a number of nearby lines observed simultaneously in the 512 MHz wide filterbank) was observed during two, often three, observing sessions. The intensities of the strong lines were found to be reproducible within 10% (2σ), a scatter which reflects the calibration uncertainty. This latter is reduced when one averages the data from independant sessions. The uncertainties in the intensity ratios of Table 3 were estimated accordingly.

TABLE 2

OBSERVED LINE REST FREQUENCIES (MHz)

TRANSITION	$^{29}SiCC$			$^{30}SiCC$		
	Observed	O-E\$	O-C#	Observed	O-E\$	O-C#
$4_{0,4} \rightarrow 3_{0,3}$	91772.0	-2.2	-0.3	90562.0	-2.0	-0.6
$4_{2,3} \rightarrow 3_{2,2}$	92882.0	0.2	0.6	91608.8	1.3	1.0
$4_{2,2} \rightarrow 3_{2,1}$	94137.3	0.4	-0.3	92793.5	1.5	-0.5

notes :

+) Measured rest frequencies assuming $V_{LSR} = -27 \text{ kms}^{-1}$. Frequency uncertainties are 0.5 MHz.

\$) Observed minus expected frequencies (expected values are derived from the "estimated" rotational constants of Table 1).

#) Observed minus calculated frequencies (calculated values are derived from the "recommended" rotational constants -see text).

Among the many new lines uncovered during our molecule search in IRC+10216 (see e.g. Guélin et al. 1986, Cernicharo et al. 1986a,b), we have detected, within 2 MHz of the predicted frequencies, the six lines presented in Fig. 1d to 1i. These lines, compared with the $^{29}SiC_2$ lines of Fig. 1a-c, have the intensity expected for the $4_{0,4} \rightarrow 3_{0,3}$, $4_{2,3} \rightarrow 3_{2,2}$, and $4_{2,2} \rightarrow 3_{2,1}$ transitions of $^{29}SiC_2$ and $^{30}SiC_2$. They can be exactly fitted in frequency, together with the lines of the main isotope, with a single substitution structure which differs only slightly from the effective structure derived by Thaddeus et al. (1984 -- see Table 2). They must then belong to the ^{29}Si and ^{30}Si isotopic substitutions of the molecule discovered by Thaddeus et al.. The new molecule must certainly contain an on-axis silicon atom. From our data, we can set an upper limit

To complete our prediction of the rotational frequencies of the rare isotopes, we need to assume a value for the distortion constants. As these should not be too different from the distortion constants of the main isotope, we simply adopt the values derived by Thaddeus et al. (1984). The resulting "expected" frequencies for the $4_{0,4} \rightarrow 3_{0,3}$, $4_{2,3} \rightarrow 3_{2,2}$, and $4_{2,2} \rightarrow 3_{2,1}$ transitions of $^{29}SiC_2$ and $^{30}SiC_2$ are given in Table 2.

For SO_2 and C_2H_2 (Lovas 1978, Bogey et al. 1986) the difference between the distortion parameters of the

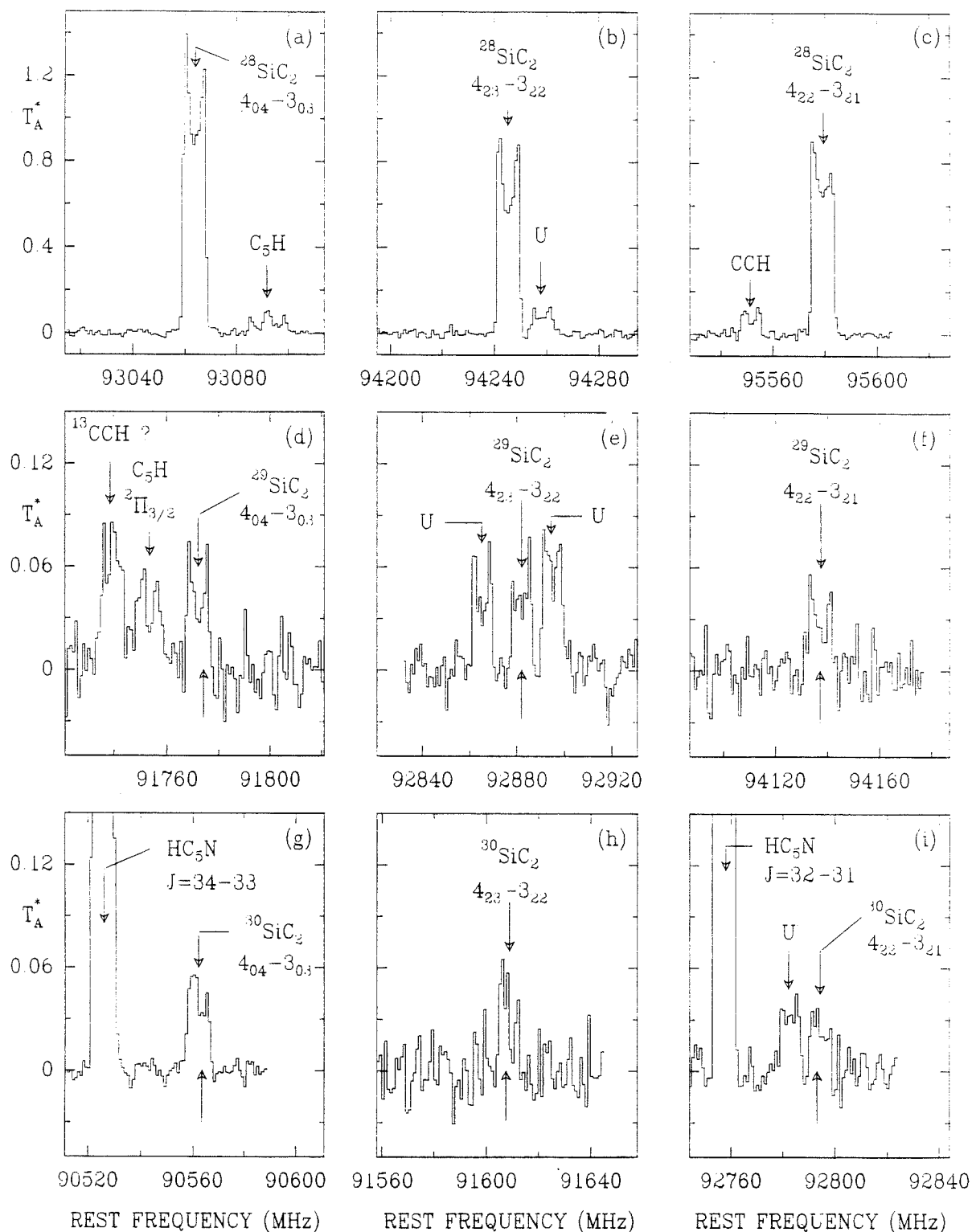


FIGURE 1 : The $4_{04} + 3_{03}$, $4_{23} + 3_{22}$, and $4_{22} + 3_{21}$ transitions of $^{28}\text{SiC}_2$, $^{29}\text{SiC}_2$ and $^{30}\text{SiC}_2$, observed towards IRC+10216 with the IRAM 30m telescope. The lower arrows in (d) to (i) indicate the positions expected a-priori for these lines (i.e. calculated from equations (4)-(6)). The upper arrows indicate the calculated positions after the rotation constants have been fitted (Table 1). The CCH line of (c) and most U-lines lie in the image sideband. The C₅H $^2\Pi_{3/2}$ J=35/2-33/2 line of Fig. 1d and the line tentatively assigned to ^{13}CCH in the same figure are also in the image side band (Cernicharo et al., 1986b).

L12

as high as 60 to the intensity ratio of the odd to even- K_1 transitions for the main isotope, showing that the odd K levels have indeed a statistical weight near to zero; as noted by Thaddeus et al. (see also Michalopoulos et al. 1984), the zero statistical weight implies a C_{2v} symmetry and two off-axis nuclei with an even mass number. The presence of a silicon atom, the C_{2v} symmetry, and the values of the inertia moments, determine completely the composition and structure of the molecule. We can thus definitely confirm the assignment of SiC_2 proposed by Thaddeus et al. (1984).

Being certain that the six new lines of Fig. 1 belong to $^{29}\text{SiC}_2$ and $^{30}\text{SiC}_2$, we can use their rest frequencies to improve the molecules' rotational constants. Assuming that the constant A and the distortion constants are identical for the three silicon isotopes, we derive from the fit of Watson's Hamiltonian (e.g. Kirchoff 1972) the values in the odd rows of Table 1. The rotational transition frequencies, calculated from the fitted constants, are listed in Table 2.

The frequencies expected for the $4_{0,0} \rightarrow 3_{0,0}$ and $4_{2,2} \rightarrow 3_{2,2}$ transitions of $^{28}\text{Si}^{13}\text{C}$ are respectively 90831.5 and 92040.7 MHz. In our spectral survey, we have covered both frequencies and marginally detected two lines with the expected intensities, respectively 1 and 4 MHz below the predicted frequencies. Higher sensitivity observations would be needed to confirm these detections and to derive accurate transition frequencies.

TABLE 3

LINE INTEGRATED INTENSITIES^{\$} (K km s^{-1})

LINE	$I(^{28}\text{SiCC})$	$I(^{29}\text{SiCC})$	$I(^{30}\text{SiCC})$
$4_{0,0} \rightarrow 3_{0,0}$	33.5 ± 1.68	1.35 ± 0.15	1.05 ± 0.05
$4_{2,2} \rightarrow 3_{2,2}$	21.7 ± 1.10	1.33 ± 0.10	0.83 ± 0.09
$4_{2,2} \rightarrow 3_{2,1}$	21.1 ± 1.10	0.97 ± 0.09	0.59 ± 0.07

^{\$}) The estimated uncertainties (1 σ) include calibration errors (see text).

TABLE 4

ISOTOPIC RATIOS

LINE	$^{28}\text{Si}/^{29}\text{Si}$	$^{28}\text{Si}/^{30}\text{Si}$	$^{29}\text{Si}/^{30}\text{Si}$
$4_{0,0} \rightarrow 3_{0,0}$	25.0 ± 4.0	31.9 ± 3.0	1.29 ± 0.20
$4_{2,2} \rightarrow 3_{2,2}$	16.3 ± 2.0	26.1 ± 4.1	1.60 ± 0.27
$4_{2,2} \rightarrow 3_{2,1}$	21.8 ± 3.1	35.8 ± 6.1	1.64 ± 0.35
AVERAGE ⁺	19.0 ± 1.5	30.7 ± 2.3	1.44 ± 0.15
TERRESTRIAL	19.6	29.8	1.52

⁺) Weight proportional to $1/\sigma^2$.

The U-shaped $^{28}\text{SiC}_2$ profiles of Fig. 1 are typical of optically thin, spatially resolved lines, so that, for each transition, the line integrated intensity ratios directly reflect the isotopic abundance ratios. These intensity ratios are listed in Table 4. As expected, they are found equal for the three observed transitions. The $^{28}\text{Si}/^{29}\text{Si}$, $^{28}\text{Si}/^{30}\text{Si}$, and $^{29}\text{Si}/^{30}\text{Si}$ isotopic ratios, averaged over the three transitions, are respectively 19.0 ± 1.5 , 30.7 ± 2.3 and 1.44 ± 0.15 (1 σ). They are very close to the terrestrial (19.6, 29.8 and 1.52) and interstellar elemental isotopic ratios ($^{28}\text{Si}/^{30}\text{Si} = 1.4 \pm 0.1$ according to Wolf 1980 and Penzias 1980). Our $^{28}\text{SiC}_2/^{29}\text{SiC}_2$ and $^{29}\text{SiC}_2/^{30}\text{SiC}_2$ abundance ratios also agree with the $^{28}\text{SiS}/^{29}\text{SiS}$ and $^{29}\text{SiS}/^{30}\text{SiS}$ ratios observed in IRC+10216 : 18.9 ± 2.2 and 1.42 ± 0.25 respectively (Kahane et al., 1986).

The isotopes of Si are probably produced during the explosive phase of the evolution of very massive stars (see e.g. Arnett 1978); their abundance shouldn't be much affected by nuclear processing in a cool red giant like IRC+10216. It is therefore not surprising that this abundance reflects the interstellar and solar system abundances.

We would like to thank A. Omont for helpful suggestions during this work.

REFERENCES

- Arnett, W.D.:1978, Ap. J. **219**, 1008.
 Bogey M., Demuynek, C., Destombes, J.L. and Dubus, H.:1986, J. Mol. Spectr. in press.
 Cernicharo, J., Kahane, C., Gómez-González, Guélin, M.:1986a, Astron. Astrophys. Letters, **164**, L1.
 Cernicharo, J., Kahane, C., Gómez-González, Guélin, M.:1986b, Astron. Astrophys. Letters, in press.
 Darling, B.T., Dennison, D.M.:1940, Physical Review, **57**, 128.
 Gordy, W., and Cook, R.L.:1970, "Microwave Molecular Spectra", Chemical Applications of Spectroscopy, Part II, Wiley-Interscience, New York.
 Grev, R.S., Schaeffer III, H.F.:1984, J. Chem. Phys., **80**, 3552.
 Guélin, M., Cernicharo, J., Kahane, C., Gómez-González, J.:1986, Astron. Astrophys., **157**, L17.
 Kahane, C., Gómez-González, J., Cernicharo, J., Guélin, M.:1986, submitted to Astron. and Astrophys.
 Kirchoff, W.H.:1972, J. Mol. Spectrosc., **41**, 333.
 Kleman, R.:1956, Ap. J. **123**, 162.
 Lovas, F.J.:1978, J. Chem. Ref. Data, **7**, 1445.
 Michalopoulos, D.L., Geusic, M.E., Langridge-Smith, P.R.R., R.E. Smalley, R.E.:1984, J. Chem. Phys., **80**, 3556.
 Penzias, A.:1980, Science, **208**, 663.
 Snyder, L.E., Henkel, C., Hollis, J.M., Lovas, F.J.:1985, Ap. J. Letters, **290**, L29.
 Thaddeus, P., Cummings, S.E., Linke, R.A.:1984, Ap. J. Letters, **283**, L45.
 Wolf, R.S.:1980, Ap. J., **242**, 1005.

C. Détection de la chaîne carbonée C_5H

C_5H est un nouvel exemple de molécule détectée dans l'espace interstellaire avant de l'être au laboratoire (voir l'article qui suit). Son identification a donc nécessité l'estimation, par le calcul, des fréquences des raies de rotation de la molécule. La méthode employée est différente de celle utilisée pour les substitués isotopiques. C'est une méthode de calcul direct des constantes rotationnelles, à partir de la géométrie supposée de la molécule.

C_5H est le deuxième membre de la famille des chaînes carbonées linéaires, du type $C_{2n+1}H$, qui présentent une alternance de simples et de triples liaisons CC ($C-C = 1.37 \text{ \AA}$, $C\equiv C = 1.21 \text{ \AA}$). Sa structure peut être déduite soit par insertion d'un groupe acétylénique $C\equiv C$ au bout de la chaîne C_3H , soit par suppression de l'atome d'azote du cyanobutadiyne HC_5N (Green, 1980)

L'une et l'autre méthodes, appliquées au calcul des constantes de rotation à l'équilibre, B_e , de C_3H et de C_4H , fournissent des estimations à mieux que 1% près des constantes rotationnelles effectives B_0 de ces espèces dans l'état vibrationnel fondamental (Gottlieb *et al*, 1985; Guélin *et al*, 1978). Nous pouvions légitimement espérer qu'il en serait de même pour C_5H . Les molécules CH et C_3H ont un état fondamental doublet Π (Brazier et Brown, 1984; Thaddeus *et al*, 1985a, Gottlieb *et al*, 1985), alors que les chaînes "paires" C_2H et C_4H se trouvent dans un état fondamental doublet Σ (Tucker *et al*, 1974, Guélin *et al*, 1978). Par analogie, nous nous attendions à trouver C_5H dans un état Π et comme il s'agit d'une molécule relativement lourde, il était probable qu'elle suivrait un cas de couplage proche du cas (a) de Hund, c'est à dire que ses raies de rotation se présenteraient sous la forme de doublets, de fréquence centrale multiple demi-entier de $2B_0$ ($\approx 4750 \text{ MHz}$) et d'espacement croissant avec J .

La recherche de ces doublets a été effectuée avec l'antenne de 30m de l'IRAM, en direction de l'enveloppe circumstellaire IRC+10216. C'est en effet une source bien connue pour sa richesse en longues chaînes carbonées et où, de plus, Thaddeus *et al* (1985a) avaient, peu de temps avant nos observations, détecté le premier radical impair C_3H . Dès les premiers spectres, observés à relativement basse fréquence (70 - 90 GHz), nous avons détecté, à des fréquences très proches de celles prédites par nos calculs, des raies composites, plus larges que les 29 km/s dus à l'expansion de l'enveloppe et présentant un pic central, au lieu de la forme en U attendue pour des raies optiquement minces (pour une discussion de la forme des raies dans IRC+10216, voir par exemple Morris, 1985, Olofsson

et al., 1982 et le chapitre 3). Quelques observations supplémentaires, à plus hautes fréquences (90 - 100 GHz), nous ont rapidement convaincu qu'il s'agissait bien là de doublets, en relations harmoniques demi-entières : à basse fréquence, les transitions rotationnelles correspondent à des J faibles et les raies du doublet sont mal résolues; à plus haute fréquence, la séparation des deux composantes augmentant avec J , il apparaît clairement que la structure observée est celle de deux raies proches. Les fréquences observationnelles des composantes des six doublets détectés ont été modélisées par la formule empirique suivante qui s'applique aux transitions de l'échelle $^2\Pi_{1/2}$ et qui tient compte de la distorsion centrifuge (voir aussi les formules I.33 à I.37):

$$\nu(J \rightarrow J-1) = 2 B_{\text{eff}} J \pm 4 D_{\text{eff}} J^3 \pm q_{\text{eff}} J \quad (\text{II.9})$$

Nous en avons déduit les valeurs de B_{eff} , D_{eff} et q_{eff} et une limite inférieure de A , la constante de couplage spin-orbite. En effet la constante de distorsion centrifuge effective, D_{eff} , se met sous la forme :

$$D_{\text{eff}} = D_0 - B_0^4 / A^3 \quad (\text{II.10})$$

La constante de distorsion D_0 peut être évaluée par comparaison avec celles de molécules d'un poids analogue, comme $\text{CH}_3\text{C}_4\text{H}$. Si on lui attribue une valeur de 100 kHz au plus, la constante de couplage spin-orbite A doit valoir au moins 800 GHz et le niveau fondamental de l'échelle $^2\Pi_{3/2}$ se trouve environ 40 K au-dessus de celui de l'échelle $^2\Pi_{1/2}$, ce qui explique que, dans un premier temps, nous n'ayons détecté que des transitions rotationnelles de cette dernière. A la suite de ces observations, il ne faisait guère de doute que nous avions détecté le radical C_5H , aucun autre candidat sérieux ne se présentant à l'esprit, à l'exception de C_4N , cependant desservi par des considérations d'abondances (les calculs de densités projetées des chaînes carbonées dans IRC+10216, (voir ci-dessus et Cernicharo *et al.*, (1987a), montrent que les chaînes azotées "impaires" CN et C_3N sont moins abondantes que les chaînes carbonées "paires" de masses analogues, C_2H et C_4H et on peut penser qu'il en sera de même pour les abondances relatives des chaînes azotées "paires" et des chaînes carbonées "impaires". En outre, le premier membre de la famille des chaînes azotées "paires", C_2N , n'a pas été détecté). Comme nous l'avons suggéré en conclusion de l'article relatant cette détection, l'observation de C_5H au laboratoire (Gottlieb *et al.*, 1986) est rapidement venue confirmer notre identification. A partir des fréquences mesurées au laboratoire, nous avons cherché et détecté des transitions de l'échelle $^2\Pi_{3/2}$ dans l'enveloppe IRC+10216 (voir l'article suivant). Ces raies ont des intensités environ une

fois et demi plus faibles que celles de l'échelle $^2\Pi_{1/2}$, ce qui s'explique par la différence d'énergie de 34 K entre les niveaux fondamentaux des deux échelles. A partir de l'aire intégrée des doublets, nous avons pu déterminer la température de rotation des transitions. La méthode employée est celle que nous avons décrite plus haut. Il apparaît que les intensités des transitions de chaque échelle s'expliquent par une température de rotation unique, un peu plus faible pour les états $^2\Pi_{1/2}$ que pour les états $^2\Pi_{3/2}$ (voir aussi le paragraphe sur la couverture spectrale d'IRC+10216). Nous avons également déduit de ces observations, et de celles de nombreuses transitions de HC_5N , observées au cours de la recherche de nouvelles molécules, une estimation du rapport d'abondances $[\text{C}_5\text{H} / \text{HC}_5\text{N}]$. Cette mesure est entachée d'incertitudes importantes dont les causes principales sont la méconnaissance de la valeur du moment dipolaire de C_5H , que nous avons supposé plus grand que celui de C_3H , mais plus petit que celui de HC_7N et, surtout, la méconnaissance de la taille des régions d'émission de C_5H et HC_5N . Compte-tenu de ces incertitudes, nous estimons que la valeur déduite de nos observations, $[\text{HC}_5\text{N}] / [\text{C}_5\text{H}] = 4$, devrait être correcte à un facteur 2 près (l'article qui suit mentionne un rapport 40, par suite d'une erreur d'un facteur 10 sur la densité projetée de C_5H).

Letter to the Editor

Tentative detection of the C_5H radicalJ. Cernicharo^{1,2}, C. Kahane¹, J. Gómez-González^{2,3}, and M. Guélin²¹ Groupe d'Astrophysique, Université de Grenoble, CERMO, BP 68, F-38402 St. Martin d'Hères Cedex, France² IRAM, Domaine Universitaire de Grenoble, Voie 10, F-38406 St. Martin d'Hères, France and Av. Divina Pastora 7, E-Granada, Spain³ Centro Astronómico de Yebes, OAN, Apartado 148, E-19080 Guadalajara, Spain

Received April 22, accepted May 22, 1986

SUMMARY

Six line doublets, discovered with the IRAM 30m telescope in the millimetre-wave spectrum of IRC+10216, have been identified as the $J=31/2-29/2$ and $J=35/2-33/2$ to $43/2-41/2$ rotational transitions of a new radical with a $^2\Pi$ ground state. The rotation and distortion constants of this radical are $B_0=2387.01\pm0.02$ MHz and $D_0=50\pm20$ Hz (2 σ). We tentatively identify the new radical with C_5H , for which we estimate $B_0=2375$ MHz from standard bond length considerations. An alternate, although less likely candidate would be C_4N .

these molecules' linear geometry and the nature of their ground state ($^2\Pi$ for CH and C_3H and $^2\Sigma$ for C_4H and C_5H). C_5H is thus probably linear like C_3H and must have a $^2\Pi$ ground state. The inertia moments and rotation constants of C_3H and C_4H can be derived to within 1% from the geometries of CH and C_2H , using standard covalent bond lengths for the additional C_2 group (see Table 1). Making the same assumption for the extra C_2 group of C_5H we calculate a rotation constant $B_0=2375$ MHz. This value of B_0 is very close to that derived by simply clipping the N atom from HC_3N (Table 1); owing to the molecule's length, it should be as accurate as the value of B_0 derived for C_3H by clipping the nitrogen atom from HC_3N ($\approx 1\%$).

Keywords: molecules - stars: circumstellar matter

Since the discoveries of the carbon chain radicals C_2H , C_3N and C_4H (Tucker et al. 1974, Guélin et al. 1977, 1978), which all have an even number of non hydrogen atoms, the question has arisen whether linear radicals with an odd number of heavy atoms could also be detected in space. The "even" radicals are obtained by clipping one H atom from the stable cyanopolyynes and acetylenic chains, and can be described by a standard valence bond structure. In contrast, the "odd" radicals have no standard bond structure and cannot be formed from closed-shell molecules without thorough rearrangement. "Odd" radicals are expected to be more reactive than the "even" and their abundance much smaller. The recent identification of the C_3H radical in the envelope of the IR star IRC+10216 (Thaddeus et al. 1985) was the first evidence that odd radicals were detectable. In this Letter, we report the tentative discovery of the next member of the odd chain, the pentynylidyne radical, C_5H . C_5H is the largest linear molecule with non-zero electronic orbital angular momentum observed so far.

To our knowledge, C_5H has never been observed in the laboratory and, prior to this work, its spectroscopic constants had not been measured. No ab-initio quantum mechanical calculation of the radical's structure had been reported, either. Yet, this structure was not so unknown as to hinder a search for C_5H in space.

The molecular structure C_5H can probably be obtained from that of C_3H by insertion of the stable acetylenic group $C\equiv C$ between the H and C atoms, since the structures of C_3H and C_4H can approximately be derived from CH and C_2H in this way (see e.g. Green 1980). The insertion of C_2 into CH and C_2H preserves

Because C_5H is heavy, its ground state is probably close to Hund's case (a). The rotational energy levels are distributed between two ladders (the $^2\Pi_{1/2}$ and $^2\Pi_{3/2}$ ladders), and the rotational frequencies in each ladder are simply given by $2Be_{\text{eff}}J$, where J is half-integer and B_{eff} , the effective rotation constant, is equal to B_0 to the accuracy of our estimate (see below). The rotational levels of both ladders being split in two by the weak interaction between the electronic and rotational motions (A-doubling), the millimetre spectrum of C_5H consists of two series of close doublets, with center frequencies almost exactly in ratios of half-integer numbers. In addition to A-doubling, the unpaired electron and the hydrogen atom give rise to hyperfine structure; this structure, however, decreases as $1/J^2$ and is unresolvable at millimetre wavelengths.

TABLE 1: OBSERVED AND CALCULATED ROTATIONAL CONSTANTS

MOLECULE	$B_0(\text{obs})$	$B_e(\text{estimated})$		error (obs-est)
		[1]	[2]	
C_3H	11186	11090	11140	1.0%
C_4H	4759	4762	4764	0.2%
C_5H	2387	2371	2377	
C_3N	11938		12160	2.0%
C_4N			2417	

notes to the Table:

[1] Calculated from the geometries of CH, C_2H or C_3H by insertion of the acetylenic group C_2 ($C-C:1.37$ Å; $C\equiv C:1.21$ Å).

[2] Calculated from the bond lengths in HC_3N or HC_5N by removing N or CH.

References: C_3H = Gottlieb et al. (1985); C_4H = Guélin et al. (1978), CCN = Kakimoto and Kasuya (1982). CH = Brazier and Brown (1984). C_5H = this paper.

Send offprint requests to: J. Cernicharo

L2

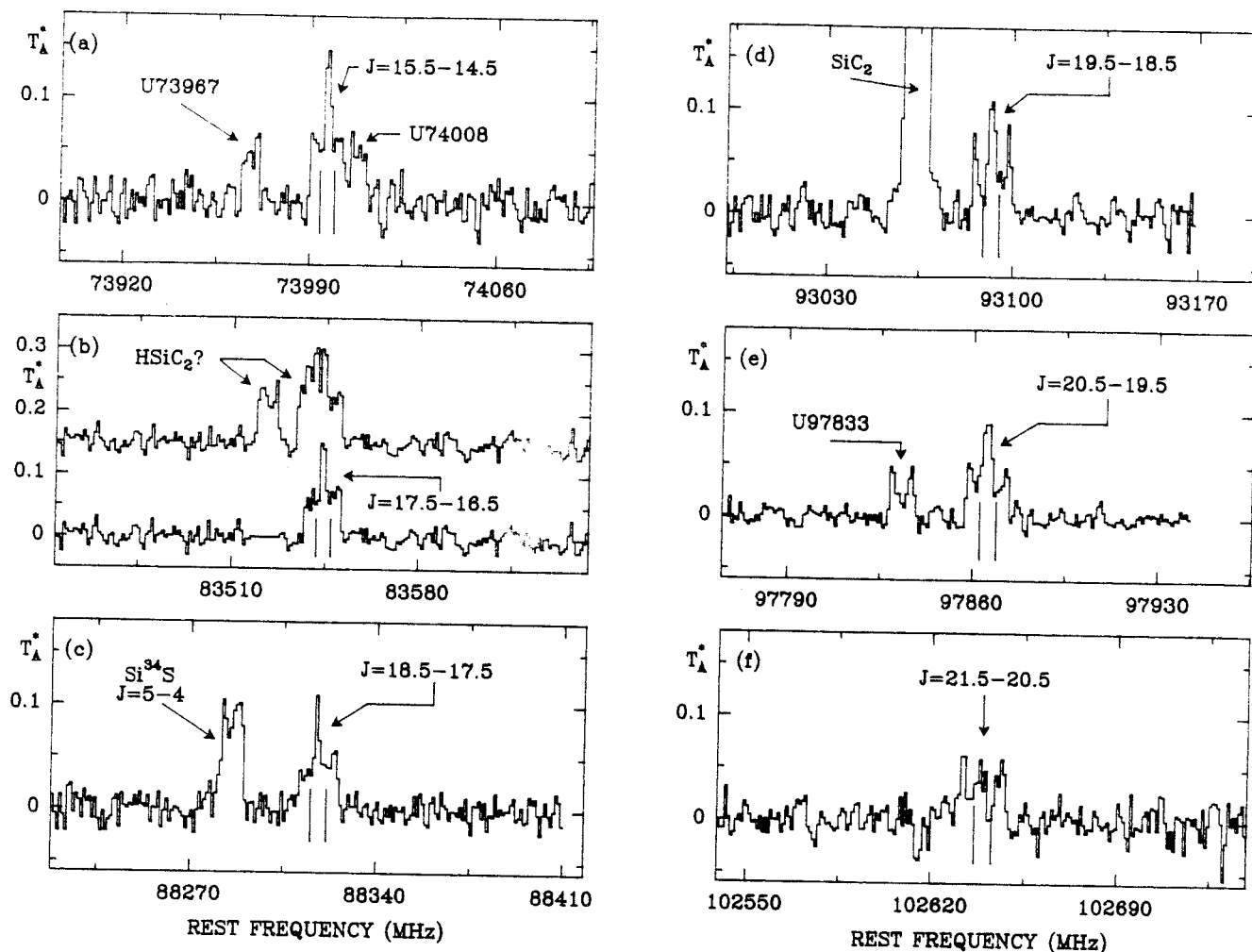


FIGURE 1: Six spectra, with centre frequencies in ratios of half-integer numbers, observed in IRC+10216 with the IRAM 30-m telescope. The broad features, at the centre of the spectra, are doublets arising from the new radical identified with C_3H ; the doublet components are indicated by vertical marks. The doublet at 83545 MHz (upper spectrum of Fig 1b) is blended with another doublet which is the $N=8-7$ transition of a $^2\Sigma$ radical (could arise from $HSiC_2$ --see Guélin et al. 1986); this latter doublet has been tentatively removed in the lower spectrum of Fig 1b (see text).

The doublet structure, the approximate rotational frequencies and especially the nearly exact harmonic relations among these frequencies are specific enough to identify the lines of C_3H , if only a few rotational transitions of this species could be detected. We therefore embarked on a search for C_3H , by observing, in IRC+10216, several 1-2 GHz-wide spectral bands centred on the predicted frequencies.

The observations were made at a wavelength of 3 mm with the IRAM 30 m telescope at Pico Veleta, Spain. The telescope was equipped with 3-mm SIS and 3-mm Schottky receivers with DSB noise temperatures of 100 - 200 K. The observing procedure has been described by Guélin et al. (1986). During most of the observations, the weather was clear and the atmospheric opacity was below 0.1. The pointing was checked every two hours on the quasar 3C273 and found to be accurate within 5", or $\approx 1/5$ of the antenna beamwidth. The temperature scale (T_A^* , the SSB antenna temperature reported above atmosphere) should be correct to within 15%.

Among the many new lines uncovered during the search (see e.g. Guélin et al. 1986), we have detected

the six characteristic features presented in Fig 1. The lines in IRC+10216 are known to have clear-cut edges and a velocity width of 28.5 kms⁻¹; when optically thin, they are U-shaped and look like the C_3H lines of Fig 2b. The central features, in Fig 1a-f have much larger widths (40 to 65 kms⁻¹) and exhibit a central peak; they must consist of a blend of lines. Using a "standard" line profile similar to that of the C_3H lines, we can resolve each one of the features in a, c, d, e, f into two slightly overlapping components of equal strengths (see e.g. Fig. 2c and 2d). The upper spectrum of Fig 1b was already reported in a previous paper (Guélin et al. 1986) and is known to consist of 4 lines, two of which belong to the 8-7 rotational transition of a radical which could be $HSiC_2$. Although only the low frequency component of this transition is resolved in Fig 1b, we know that the high frequency component has the same strength and lies exactly 15.1 MHz higher. In the lower spectrum of Fig 1b, we have subtracted from the original spectrum the low frequency component and its image shifted by 15 MHz. There remains right at the center a 15 MHz (45 kms⁻¹) -broad, centrally peaked feature, almost identical to that of Fig 1a; this feature is readily resolved into two "standard" lines of equal intensities.

The result of the "standard" line fit to the six central features of Fig 1 is given in Table 2 (see also the vertical marks on Fig 1). It shows that the six line doublets have, from a to f, a regularly increasing splitting and a decreasing strength. Most remarkably, the six doublet center frequencies are, within 1 MHz, half-integer multiples of a common frequency, 4774 MHz. (They should not be considered as integer multiples of half that frequency, since we couldn't detect any even multiple of 2387 MHz --see e.g. Fig 3). Almost certainly all six doublets are related and arise from a single linear molecule. This latter, because the multiples are half-integer, must have a $^2\Pi$ ground state. Its rotation constant is 2387 MHz, so close to the B_0 value derived above, that it is hard not to conclude that we have detected C_3H or a very closely related species.

TABLE 2: LINE PARAMETERS

J_u	J_l	Freq. Obser. ¹ (MHz)	Obs-Calcd ² (MHz)	Split. (MHz)	Intensity K kms
15.5	14.5	73993.8 (0.3)	-0.3	5.1	2.0 (0.2)
		73998.9 (0.4)	0.0		1.9 (0.2)
17.5	16.5	83541.5 (0.8)	0.0	5.6	1.7 (0.3)
		83547.1 (0.6)	0.2		2.2 (0.2)
18.5	17.5	88315.2 (0.4)	0.1	5.8	0.8 (0.2)
		88321.0 (0.4)	0.0		1.1 (0.2)
19.5	18.5	93089.0 (0.3)	0.2	5.9	1.3 (0.1)
		93094.9 (0.4)	0.1		1.5 (0.1)
20.5	19.5	97862.6 (0.4)	0.1	6.2	1.2 (0.1)
		97868.8 (0.4)	0.0		1.1 (0.1)
21.5	20.5	102635.7 (0.7)	-0.3	6.7	1.1 (0.2)
		102642.4 (0.7)	-0.3		1.0 (0.2)

1) for $V_{lsr} = -27 \text{ kms}^{-1}$.

2) see text.

The numbers in parenthesis are 1σ deviation.

Before discussing what species the new radical could be besides C_3H , let us derive more precisely its spectroscopic constants. In the limiting case (a) of Hund, where $2BoJ$ is small compared with the spin-orbit coupling constant A , the rotation frequencies, taking into account centrifugal stretching, are given by:

$$v(J+J-1) = 2Bo(1 \pm Bo/A \pm \dots)J - 4(D_0 \pm Bo^2/A^3 \pm \dots)J^3, \quad (1)$$

where the $-$ signs apply to transitions between $^2\Pi_{1/2}$ levels and the $+$ signs to transitions between $^2\Pi_{3/2}$ levels; D_0 is the stretching constant. The energy splitting is given for low J for the $^2\Pi_{1/2}$ levels by:

$$E/h(J+J-1) = 2q_A J, \quad (2)$$

and for the $^2\Pi_{3/2}$ levels by:

$$E/h(J+J-1) = 2q'_A J(J^2 - 1/4). \quad (3)$$

For large J , when $2BoJ$ is comparable to A , additional terms should be added to these relations, which become rather involved (see e.g. Townes and Schawlow 1975, p.186 and 190).

We have fitted the line frequencies of Table 2 by the empirical expression:

$$v(J+J-1) = 2B_{eff}J - 4D_{eff}J^3 \pm 1/2 \times q_{eff}J, \quad (4)$$

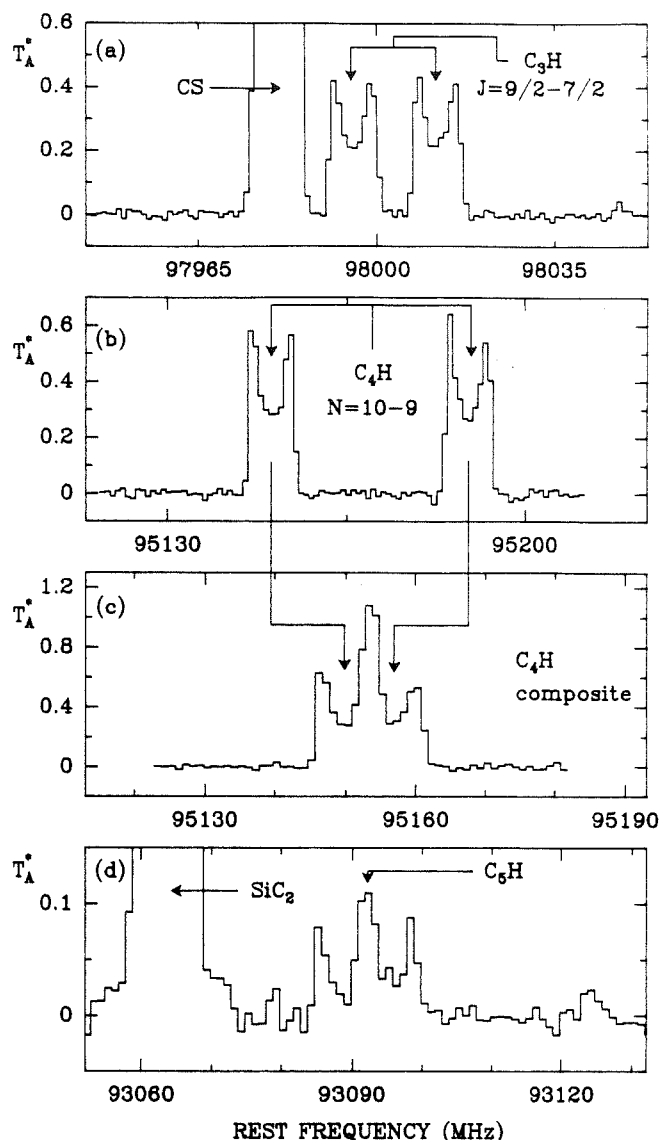


FIGURE 2: a) and b) the $\Omega=1/2$ $J=9/2-7/2$ transition of C_3H and the $N=10-9$ transition of C_4H , observed towards IRC10216 with the 30-m. telescope. c) The $N=10-9$ transition of C_4H , as it would appear if the doublet splitting were 6 MHz instead of 39 MHz. d) The central feature of Fig. 1d in an expanded scale.

and found:

$$\begin{aligned} B_{eff} &= 2387.01 \pm 0.02 \text{ MHz}, \\ D_{eff} &= 50 \pm 20 \text{ Hz}, \\ q_{eff} &= 320 \pm 40 \text{ kHz}, \end{aligned}$$

where the errors are twice the standard deviation.

The residuals to the fit (Table 2) are ≈ 0.2 MHz and are of the same order of magnitude as the estimated accuracy of the measurements (0.4 MHz). This shows that eqs (1) and (4) are quite adequate for describing the observed spectrum, and that rotational frequencies with quantum numbers as high as 20 still follow Hund's case (a): the spin-orbit coupling constant, A , must therefore be relatively large.

L4

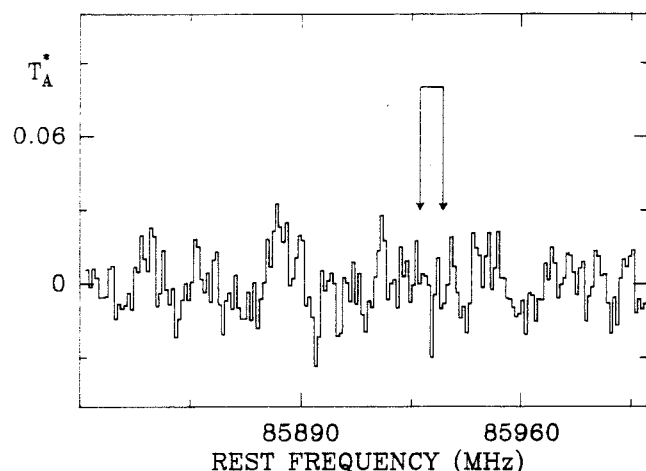


FIGURE 3: The position where a seventh doublet identical to those of Fig 1 would lie, if these doublets were transitions of quantum numbers 31, 35... and not 31/2, 35/2.

A lower limit to the constant A (which gives the difference in energy between the $^2\Pi_{1/2}$ and the $^2\Pi_{3/2}$ ladders) can be derived from the value found for Deff, the J^3 term of eq (1). Deff is the difference between Do (the distortion constant) and Bo^2/A^3 (a spin uncoupling term). Do should not be much larger than 100 Hz for a molecule of the weight of C_3H (see e.g. CH_3C_2H , for which $D_J = 86.7$ Hz, -Bester et al. 1984), so that probably $A \geq 28$ cm $^{-1}$. This large value of A implies that $Bo-Beff = B/A \leq 3 \cdot 10^{-3}$, so that the $^2\Pi_{3/2}$ transitions lie at most ≈ 500 MHz above the observed ones (We assume that C_3H has a "regular" fine structure, like CH, C_2H and CCN). We didn't detect these transitions to a level $\approx 1/3$ of those observed. This is not surprising, since the $^2\Pi_{1/2}$ rotational levels are found to lie more than 40 K above the corresponding $^2\Pi_{3/2}$ levels.

Could any molecule, other than C_3H , be the carrier of our six doublets? If yes, it should be linear, have a $^2\Pi_{1/2}$ ground state and have a rotation constant of 2387 MHz. For this, it must have an odd number of electrons and, if it consists of cosmically abundant elements, it should be formed of 5 second row element atoms, plus may be one, possibly two H atoms. Indeed, linear molecules with 4 or 6 second row atoms are far too short or too long to match the experimental Bo value (For example, the rotation constant of HC_3N is 4549 MHz and that of HC_5N 1331 MHz). A molecule with three second row and one third row atom could come closer to the sought value (the estimated Bo values for the likeliest species, such as HC_3Si , are $\approx 10\%$ too high, however), but seems less likely from abundance considerations.

Among the molecules with 5 second row atoms, the most obvious candidate, besides C_3H , is C_4N . This radical is isoelectronic with C_3H and must have the correct $^2\Pi$ ground state. Its rotational constant can be estimated to be very close to the observed value (Table 1). On spectroscopic grounds, this molecule seems thus as likely as C_3H . Abundance considerations, however, favor C_3H . In IRC+10216, as in interstellar clouds, the carbon-hydrogen radicals C_2H , C_3H and C_4H are known to be 3 to 10 times more abundant than their carbon-nitrogen analogs, CN, C_2N and C_3N . One would similarly expect that C_3H is more abundant than C_4N .

Yet, we didn't detect another molecule with a similar Bo constant in a 10-GHz broad frequency survey of the spectrum of IRC+10216. As there is no evidence that the dipole moment of C_3H must be significantly lower than that of C_4N , it seems reasonable to conclude that we have probably detected C_3H .

An astronomical test which could help to decide between C_3H and C_4N , would be the detection of a low quantum number rotational transition. For J values equal to 9/2 or smaller ($\nu(9/2 \rightarrow 7/2) = 21.48$ GHz), the hyperfine structure could be resolvable in a low velocity dispersion source like TMC1. C_3H has already been observed in that source and the new molecule could well be detectable there; the resolution of the hyperfine structure would tell if it has an H or an N atom. Of course, the best confirmation of the radical's identity would be its detection in the laboratory.

We are indebted to C. Demuyck for comments on the manuscript.

Note added in proof:

Gottlieb, Gottlieb and Thaddeus have just succeeded in observing our new radical in the laboratory and confirm that it must be C_3H rather than C_4N . They describe their work in the following Letter where they derive more accurate spectroscopic constants. Using these constants, we were able finally to detect the $^2\Pi_{1/2}$ ladder.

REFERENCES

- Bester, M., Yamada, K., Winnewisser, G., Joentgen, W., Altenbach, H. -J., and Vogel, E. :1984, *Astron. and Astrophysics Letters*, 137, L20.
- Brazier, C. R., Brown, J. M. :1984, *Can. Journal of Physics*, 62, 1563.
- Gottlieb, C. A., Vrtilek, J. M., Gottlieb, E. W., Thaddeus, P. :1985, *Ap. J. Letters*, 294, L55
- Green, S.:1980, *Ap. J.* 240, 962.
- Guélin, M., and Thaddeus, P. : 1977, *Ap. J. Letters*, 212, L81.
- Guélin, M., Green, S. and Thaddeus, P.:1978, *Ap. J. Letters*, 224, L27.
- Guélin, M., Cernicharo, J., Kahane, C., Gomez-Gonzalez, J. : *Astron. Astrophys.*, 157, L17
- Kakimoto, M., Kasuya, T. :1982, *J. Molec. Spectrosc.*, 94, 380.
- Thaddeus, P., Gottlieb, C. A., Hjalmarson, A., Johansson, L. E. B., Irvine, W. M., Friberg, P. and Linke, R. A. :1985, *Ap. J. Letters*, 294, L49.
- Townes, C. H., Schawlow, A. L. :1975, *Microwave Spectroscopy*, Dover, New York.
- Tucker, K. D., Kutner, M. L., Thaddeus, P. :1974, *Ap. J. Letters*, 193, L115.

Astron. Astrophys. 167, L5-L7 (1986)

ASTRONOMY
AND
ASTROPHYSICS

Letter to the Editor

Detection of the ${}^2\Pi_{3/2}$ state of C_5H J. Cernicharo^{1,2,3}, C. Kahane¹, J. Gómez-González^{2,3,4}, and M. Guélin^{2,3}¹ Groupe d'Astrophysique, Université de Grenoble, CERMO, BP68, F-38402 St. Martin d'Hères Cedex, France² IRAM, Domaine Universitaire de Grenoble, Voie 10, F-38406 St. Martin d'Hères, France³ Av. Divina Pastora 7, Granada, Spain⁴ Centro Astronómico de Yebes, OAN, Apartado 148, E-19080, Spain

Received July 15, accepted August 1, 1986

SUMMARY

We report the detection in the molecular envelope of IRC+10216 of four doublets of the ${}^2\Pi_{3/2}$ ladder of C_5H , a new radical recently discovered by Cernicharo et al. (1986a). From the line intensities we derive rotational temperatures of 14 and 24 K for the ${}^2\Pi_{1/2}$ and ${}^2\Pi_{3/2}$ ladders respectively. The C_5H column density, averaged over our 25" beam, is found to be about $\text{few} \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. The abundance ratio HC_5N/C_5H is found to be ≈ 40 within a factor 2.

Keywords: molecules-circumstellar matter

The pentynylidyne radical, C_5H , has recently been discovered in the envelope of the IR star IRC+10216 through the observation of 6 rotational transitions (Cernicharo et al., 1986a). The observed lines, which consisted of doublets with harmonically related center frequencies, bore the unmistakable signature of a linear, open-shell molecule, in a ${}^2\Pi$ electronic ground state. The effective rotational constant of the new radical could precisely be derived and, among the species likely to be abundant in IRC+10216, pointed to C_5H with little ambiguity. This astronomical identification of C_5H was subsequently confirmed in the laboratory (Gottlieb, Gottlieb and Thaddeus, 1986).

The interaction between the unpaired electron of C_5H and the orbital angular momentum splits the Π electronic ground state into two substates (with $\Omega=1/2$ and $\Omega=3/2$ respectively), consisting each of a ladder of rotational levels (see Fig. 1). The ${}^2\Pi_{3/2}$ ladder is found to lie 23.7 cm^{-1} (or 34 K) above the ${}^2\Pi_{1/2}$ ladder (Gottlieb, Gottlieb and Thaddeus, 1986). The rotational levels of both ladders are further split by lambda-doubling. As a result, the millimeter spectrum of this radical consists of two series of regularly spaced doublets.

In our original survey, we observed the ${}^2\Pi_{1/2}$ ladder, but failed to detect any transition of the ${}^2\Pi_{3/2}$ ladder because its lines are weaker and because we could only crudely guess its transition frequencies. The detection of the ${}^2\Pi_{3/2}$ ladder in the laboratory, and the accurate measurement of its spectroscopic constants by Gottlieb, Gottlieb and Thaddeus (1986), prompted us back to the telescope to re-observe, with a better sensitivity, at the laboratory derived frequencies. Because of the expected weakness of the C_5H ${}^2\Pi_{3/2}$ lines, we concentrated ourselves on the lowest transitions reachable with the low noise 3-mm SIS receiver.

Send offprint requests to: J. Cernicharo

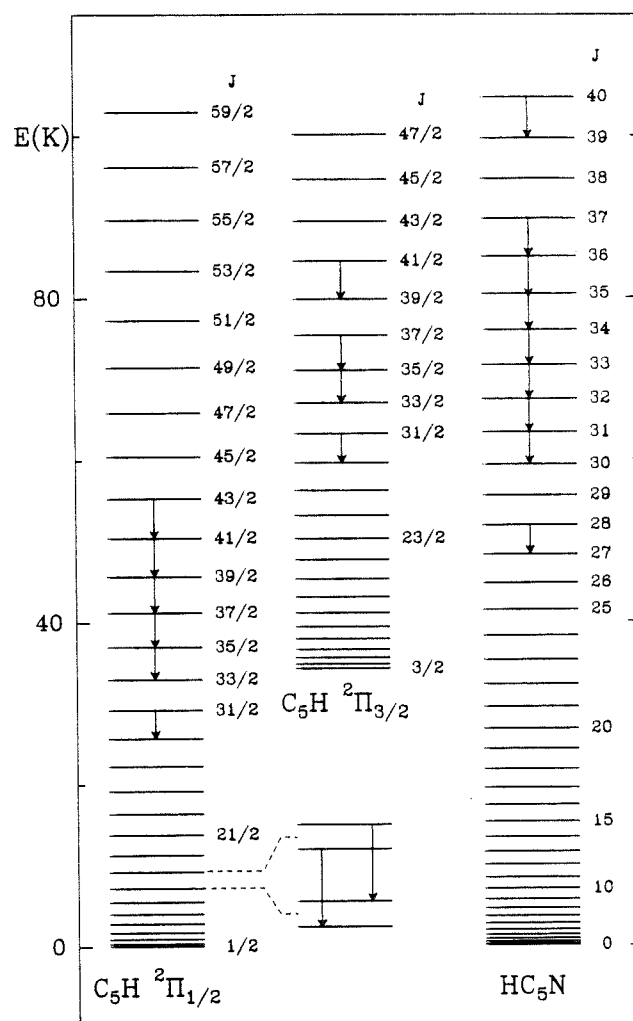


FIGURE 1 : Lower rotational energy levels of C_5H and HC_5N . The energy difference between the ${}^2\Pi_{3/2}$ and the ${}^2\Pi_{1/2}$ ladders is 34 K (Gottlieb, Gottlieb and Thaddeus, 1986). The lambda-doubling splitting of the levels is shown in an expanded scale for two energy levels of the ${}^2\Pi_{1/2}$ ladder. HC_5N is a closed-shell molecule; several transitions of this molecule were observed during our C_5H search. The observed transitions of C_5H and HC_5N are denoted by arrows. The transitions of the C_5H ${}^2\Pi_{1/2}$ ladder are those reported by Cernicharo et al., (1986a).

L6

The observations were made in May 1986 with the IRAM 30-m telescope at Pico Veleta, Spain. The telescope was equipped with a 3-mm SIS receiver with DSB noise temperature of 100 K. The observing procedure has been described by Guélin et al. (1986). During most of the observing period, the weather was clear and the atmospheric opacity was ≈ 0.05 . The pointing and focus were checked every two hours on the quasar 3C273. Pointing was found to be accurate within 3". Figure 2 shows the four lines we detected at the frequencies of the $J_u=41/2, 37/2, 35/2$ and $31/2$ $^2\Pi_{3/2}$ rotational transitions (see also Table 1). The ordinate scale is T_A , the effective SSB antenna temperature above atmosphere. The abscissa is rest frequency, assuming a source LSR velocity of -27 kms $^{-1}$.

The widths of the central features of Fig. 2a to 2c are systematically 1-2 MHz larger than those of unsplit lines, such as the HC_5N lines of Fig. 2a and 2d. They correspond to the width expected for two overlapping lines of equal strength, whose separation is equal to the lambda-doubling splitting. The four features having nearly equal intensities, we are confident that they are the sought transitions of the $^2\Pi_{3/2}$ ladder.

The integrated line brightness temperatures of the four doublets are given in Table 1. They have been corrected for beam dilution assuming a source size of 20" (equal to the size of the HCN source). The errors quoted in Table 1 include a calibration error of 10% (2, see Cernicharo et al., 1986b).

TABLE 1

DERIVED $\text{C}_5\text{H } ^2\Pi_{3/2}$ LINE PARAMETERS

TRANSITION	ν (MHz) ⁺	S^+	$T_{\text{B}}(\text{K})^+$	$W(\text{Kkms}^{-1})$
31/2-29/2	74497.176	15.339	63.3	5.2 ± 1.0
	74498.617	15.339	63.3	
35/2-33/2	84108.582	17.357	71.1	4.7 ± 0.8
	84110.414	17.357	71.1	
37/2-35/2	88914.140	18.365	75.4	4.9 ± 0.7
	88916.185	18.365	75.4	
41/2-39/2	98524.939	20.378	84.6	4.5 ± 0.9
	98527.443	20.378	84.6	

notes:

+) From Gottlieb, Gottlieb and Thaddeus (1986).

The integrated line brightness temperatures of the observed transitions in the $^2\Pi_{1/2}$ and $^2\Pi_{3/2}$ ladders are represented in Fig. 3 as a function of the upper rotational level energy. To make the graph directly interpretable in terms of rotation temperatures, the ordinate is as usual $\log(3kW/8\pi^2\nu S)$, where S is the line strength, ν the line frequency, and W the integrated line intensity. In this standard representation, rotational transitions excited to a single rotation temperature, T_{B} , should fall on a straight line of slope $\log(e)/T_{\text{B}}$. The intersection point of this line with the y axis is $\log(Nu^2/Z)$, where Z is the partition function, N the column density, and μ the molecule dipole moment.

Although the data points on Fig. 3 show that the $\Omega=1/2$ and $\Omega=3/2$ ladders can each be fitted by a straight line, it is clear that no single rotation temperature accounts for the whole data. The $\Omega=1/2$ and $\Omega=3/2$ ladders being radiatively connected only by weakly allowed transitions, the cross ladders temperature, T_{CB} , may be closer to the kinetic temperature than to the intra-ladder rotation

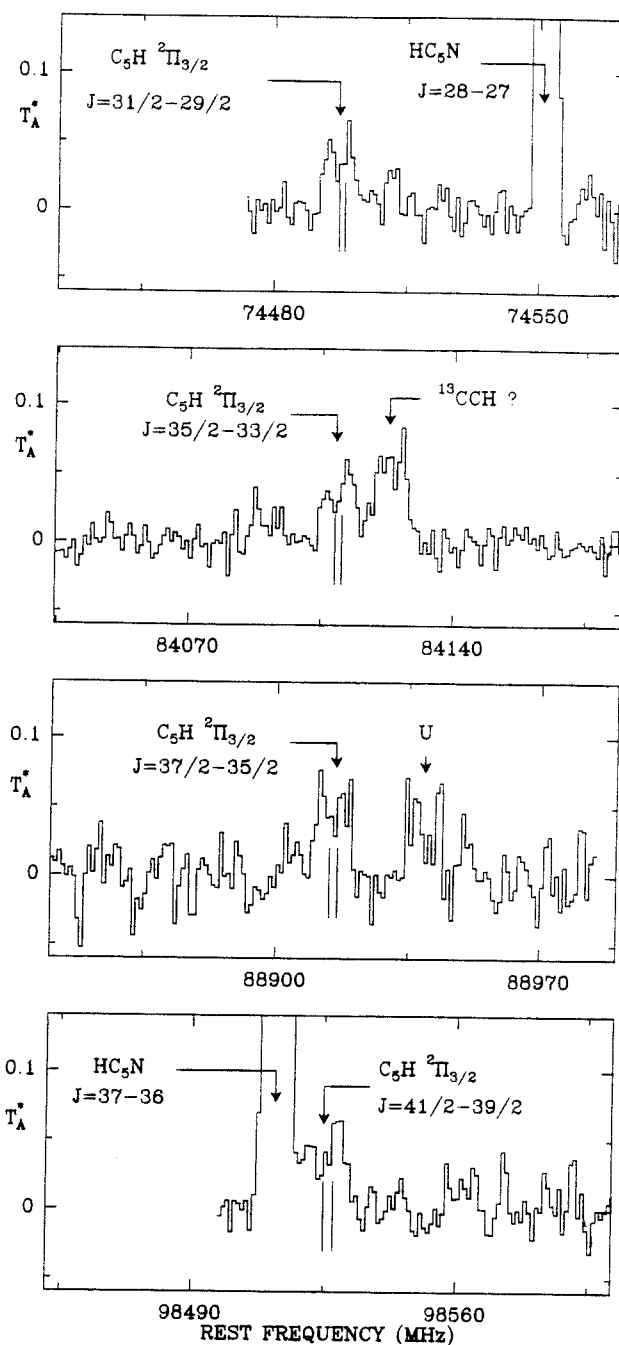


FIGURE 2 : The four $\text{C}_5\text{H } ^2\Pi_{3/2}$ doublets observed towards IRC+10216. Rest frequencies were derived for a LSR source velocity of -27 kms $^{-1}$. The line 15 MHz above the C_5H line in Fig. 2b is tentatively assigned to the $N=1 \rightarrow 0$ transition of ^{13}CCH (see text). The weak feature 20 MHz below the C_5H line of Fig. 2b is the residual of a line of $^{29}\text{SiC}_2$ in the image side band (Cernicharo et al., 1986b).

temperature. That we find $T_{\text{CB}}=50-90$ K is therefore not surprising. What is more significant is that we derive different rotation temperatures for the $\Omega=1/2$ and $3/2$ ladders, 14 ± 2 and 24 ± 3 K. This shows, as could have been anticipated, that the IRC+10216 molecular envelope cannot be represented by an homogeneous shell with a uniform temperature. The molecular excitation in the IRC+10216 envelope, due to collisions and/or IR

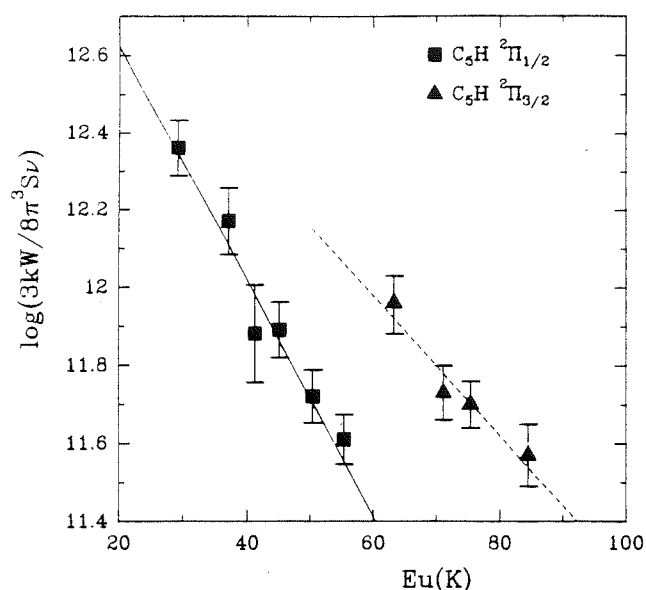


FIGURE 3 : Rotation temperature diagram of C_5H in IRC+10216. Each data point represents the sum of the two lambda-doubling components of the transitions reported in Table 1 (this paper) and Table 2 of Cernicharo et al., 1986a (the intensities have been corrected for beam dilution).

radiation, is probably a function of the distance to the central star, so that no single parameter can account for the excitation along the line of sight.

It is interesting to make the same analysis for HC_5N , a heavy linear molecule of high abundance in IRC+10216. Fig. 1 shows the rotational energy level diagram of HC_5N and Fig. 4 the standard rotation temperature diagram of this molecule in IRC+10216. The nine HC_5N transitions of Fig. 4 were observed during our C_5H search (Cernicharo et al., 1986a). Their integrated line intensities, corrected for beam dilution and beam efficiency, are given in Table 2. The rotational temperature we derive for HC_5N is 24 ± 2 K, i.e., equal to that of the $2\Pi_{3/2}$ ladder of C_5H . Because the energies involved for these HC_5N transitions are similar to those of the C_5H $2\Pi_{3/2}$ ladder, this agreement supports the multilayer molecular excitation model in IRC+10216.

Determination of column densities in a source with non uniform excitation requires the observation

TABLE 2

DERIVED HC_5N LINE PARAMETERS

TRANSITION	ν (MHz)	S	Eu(K)	W (K km s ⁻¹)
28+27	74551.13	28	51.9	37.1 \pm 5.6
31+30	82539.24	31	63.4	39.7 \pm 6.0
32+31	85201.56	32	67.5	30.1 \pm 4.5
33+32	87863.87	33	71.7	26.7 \pm 4.0
34+33	90526.15	34	76.0	27.7 \pm 4.1
35+34	93188.41	35	80.5	26.3 \pm 3.9
36+35	95850.65	36	85.1	19.5 \pm 2.9
37+36	98512.86	37	89.8	14.5 \pm 2.2
40+39	106499.35	40	104.8	9.5 \pm 1.4

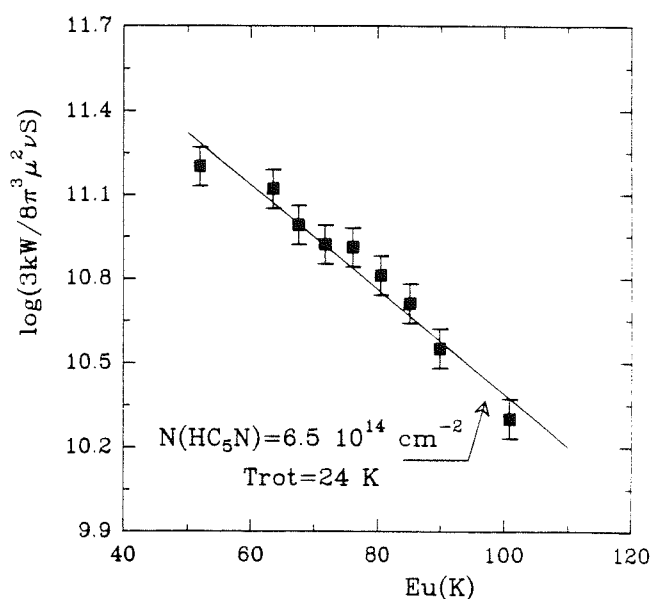


FIGURE 4 : Rotational temperature diagram of HC_5N in IRC+10216. Line parameters are given in Table 2.

of a large number of rotational transitions spread on a wide range of energy levels. From our limited data, we can only make rough estimates of the C_5H and HC_5N column densities. For C_5H we have first to guess a value of the dipole moment. It seems reasonable to assume that this moment is larger than that of C_4H (the dipole moment of cyanopolynes increases regularly from HCN to HC_5N), but smaller than that of HC_3N ; we adopt then $\mu = 4 \pm 1$ D. The column density we derive for C_5H is 1.7×10^{13} cm⁻² (the partition function was calculated assuming different rotation temperatures for the $\Omega=1/2$ and $\Omega=3/2$ ladders). That of HC_5N , assuming $T_{rot} = 24 \pm 2$ K, is 6.5×10^{14} cm⁻². We therefore derive a HC_5N/C_5H abundance ratio of 40, which should be correct within a factor of 2.

The upper line of Fig. 2b has a rest frequency ($\nu = 84124$ MHz) close to those which can be derived for the $N=1+0$, $J=3/2+1/2$, $F=5/2+3/2$ and $3/2+1/2$ hyperfine components of ^{13}CCH ($\nu = 84129$ and 84134 MHz respectively). Its width (12 MHz) is 4 MHz larger than the width of the HC_5N line of Fig. 2a (8 MHz), and could result from the overlap of these two ^{13}CCH components. The 84124 line is also observed in Sgr B2 (unpublished results), a source where Guélin, Cernicharo and Linke (1982), have tentatively assigned an unknown line to the $N=1+0$ transition of $C^{13}CH$, the other ^{13}C isotope of CCH.

REFERENCES

- Cernicharo, J., Kahane, C., Gómez-González, J., Guélin, M.: 1986a, *Astron. and Astrophys. Letters*, **164**, L1.
 Cernicharo, J., Kahane, C., Gómez-González, J., Guélin, M.: 1986b, *Astron. and Astrophys. Letters*, in press.
 Gottlieb, C.A., Gottlieb, E.W., Thaddeus, P.: 1986, *Astron. and Astrophys. Letters*, **164**, L5.
 Guélin, M., Cernicharo, J., Kahane, C., Gómez-González, J.: 1986, *Astron. and Astrophys. Letters*, **157**, L17.
 Guélin, M., Cernicharo, J., Linke, R.A.: 1982, *Ap. J. Letters*, **263**, L89.

D. Identification de la chaîne carbonée C_6H

A l'examen des abondances relatives des chaînes carbonées déjà détectées dans IRC+10216, CCH, C_3H , C_4H (Tucker *et al*, 1974, Thaddeus *et al*, 1985, Guélin *et al*, 1978), nous nous attendions à ce que C_6H soit plus abondante que C_5H et donc plus aisément détectée et identifiée. Cependant, cette identification (voir l'article qui suit et Suzuki *et al*, 1986) a été longtemps retardée par le comportement, a priori inattendu, de cette molécule. Le calcul de la constante rotationnelle à l'équilibre de C_6H , $B_e = 1388$ MHz, avait été effectué selon une méthode tout-à-fait identique à celle utilisée pour C_5H , à partir de la constante rotationnelle de C_4H . En outre, par analogie avec le comportement des chaînes carbonées "paires" déjà connues, CCH et C_4H (Tucker *et al*, 1974, Guélin *et al*, 1978), nous nous attendions à ce que l'état électronique fondamental de C_6H soit un état doublet Σ .

Nous avons donc recherché des doublets d'espacement constants, dont la fréquence centrale serait un multiple **entier** de $2B$. Afin d'être sûrs de "couvrir" les fréquences d'au moins 5 de ces doublets, nous avons observé une vingtaine de spectres double bande de 2×500 MHz de large, couvrant la gamme 83 GHz à 98 GHz.

A notre grande surprise, aucune série de doublets ayant les caractéristiques attendues n'a été détectée. La seule série de doublets en relations harmoniques entières observée ne pouvait être attribuée qu'à une molécule beaucoup plus légère que C_6H (voir le paragraphe E). En revanche, nous avons détecté une série de doublets dont les fréquences centrales étaient en relations harmoniques **demi-entières** et correspondaient à une constante rotationnelles $B_0 = 1386$ MHz. Cette caractéristique, ajoutée à l'augmentation avec le nombre quantique J de l'espacement des raies des doublets, était la signature indiscutable d'une molécule de type doublet Π , ce qui éliminait a priori C_6H ! Il n'en demeurerait pas moins que le remarquable accord entre la constante rotationnelle observée et celle prédite pour C_6H était troublant. Les autres candidats recevables étaient peu nombreux : la molécule devait être linéaire, lourde et posséder un nombre impair d'électrons. En limitant les recherches aux éléments les plus abondants, nous étions amenés à conclure que l'espèce cherchée devait être constituée de six atomes lourds (C, N, Si ou O, ce dernier atome étant peu probable car dans l'enveloppe d'une étoile carbonée, l'essentiel de l'oxygène est consommé par CO). Les seules possibilités raisonnables, outre C_6H , étaient C_5N et son isomère C_4NC ou HC_4Si . Nos calculs prédisaient pour les deux premières espèces une constante rotationnelle de 1398 MHz, en moins bon accord avec les observations, et de plus, des considérations sur l'abondance relative des chaînes carbonées et azotées déjà observées

dans IRC+10216 (C_4H est plus abondante que C_3N), desservait ces deux espèces. HC_4Si demeurerait cependant une alternative tout à fait plausible : la constante rotationnelle prédite vaut 1390 MHz, et les molécules siliciées sont nombreuses et abondantes dans l'enveloppe IRC+10216.

Afin de trancher entre les deux espèces, J. Cernicharo, M. Guélin, K. Menten et C.M. Walmsley ont décidé de rechercher cette molécule dans une source de caractéristiques tout à fait différentes, le nuage froid TMC1, où les chaînes carbonées sont abondantes mais où l'on ne détecte pas de molécules siliciées, car le silicium à basse température est condensé sur les grains de poussière. En outre, les observations, réalisées à basse fréquence (20 GHz) avec l'antenne de 100m de diamètre d'Effelsberg, devaient permettre de résoudre la structure hyperfine de la molécule. La détection de quatre raies (Cernicharo *et al*, 1987a) a permis de conclure qu'il s'agissait très vraisemblablement de C_6H . Le dernier argument qui jouait contre C_6H était la nature de l'état fondamental de la molécule. Or, des calculs de chimie quantiques réalisés par Pauzat et Ellinger ont montré que la différence d'énergie entre les états Π et Σ décroît de CCH à C_4H et change probablement de signe à partir de C_6H . Comme dans le cas de C_5H , une confirmation définitive de l'identification de C_6H est rapidement venue de son observation au laboratoire (Pearson *et al*, 1988).

Detection of a heavy radical in IRC + 10216: The hexatriynyl radical C₆H?

M. Guélin¹, J. Cernicharo^{1,2}, C. Kahane³, J. Gomez-Gonzalez^{1,3}, and C. M. Walmsley⁴

¹ IRAM, Domaine Universitaire de Grenoble, Voie 10, F-38406 St. Martin d'Hères, France, and Av. Divina Pastora 7, Granada, Spain

² Groupe d'Astrophysique, Université de Grenoble, CERMO, BP 68, F-38402 St. Martin d'Hères Cedex, France

³ Centro Astronomico de Yebes, OAN, Apartado 148, E-19080 Guadalajara, Spain

⁴ Max-Planck-Institut für Radioastronomie, Auf dem Hügel 69, D-5300 Bonn 1, Federal Republic of Germany

Received December 18, 1986, accepted January 17, 1987

Summary. Six line doublets and two related lines, discovered with the IRAM 30 m telescope in the millimetre-wave spectrum of IRC+10216, are identified as the $J=26.5 \rightarrow 25.5$ and $J=29.5 \rightarrow 28.5$ through $35.5 \rightarrow 34.5$ rotational transitions of a new "non terrestrial" molecule in a $^2\Pi$ state. The new radical has an effective rotation constant of 1386.245 MHz and is thought to contain 5--6 heavy atoms. It is observed at centimetre wavelengths in TMC1, a cold interstellar cloud, known to be rich in carbon chain molecules. We identify it with C₆H.

keywords: radio lines : molecular; stars : circumstellar matter; interstellar medium : molecules.

Since the discovery of the heavy radicals C₃N and C₄H in the envelope of the carbon star IRC+10216 (Guélin and Thaddeus 1977, Guélin et al. 1978), it has become clear that many reactive species can be detected in space. First of all, C₅N and C₆H.

The radicals C₃N and C₄H have an electronic structure very like those of cyanoacetylene (HC₃N) and diacetylene (HC₄H), and are probably formed together with these stable species (see e.g. Kroto et al. 1986). Similarly, C₅N and C₆H are linked with HC₅N and HC₆H, the next members of the cyanopolyyne and polyacetylene families, and should have related abundances. In IRC+10216, the abundance of cyanopolyyne decreases slowly from HC₃N to HC₁₁N; a similar behaviour is expected for the carbon chain radicals. In fact, the abundances of C₃N and C₄H are only a factor of ~5 smaller than those of CN and C₂H and are still quite large. C₅N and C₆H should not be much less abundant than these species; they should be detectable if they are polar molecules. The same reasoning, based on the observed abundance of C₃H (Thaddeus et al. 1985), had convinced us previously that C₅H could also be detected.

Neither C₅N nor C₆H have been observed so far in the laboratory (and this was the case for C₅H prior to our work). The observation of these species in space, besides yielding clues to the carbon chain chemistry, offers the possibility of deriving basic spectroscopic data on a remarkable family of

radicals. In a previous Letter (Cernicharo et al. 1986), we reported the discovery of C₅H. In this Letter, we report that of a heavier radical which may be C₆H.

The observations were made between October 1985 and May 1986 with the IRAM 30m telescope at Pico Veleta, Spain. The telescope characteristics and the observing procedure have been described previously (Guélin et al. 1986). The pointing accuracy was better than 5", or 1/5 of the antenna beam (HPBW= 25" at 90 GHz); the temperature scale (T_a^* , the effective SSB antenna temperature above the atmosphere) should be correct to within 20%.

The linear open shell radicals C₅N and C₆H have a millimetre spectrum consisting of regularly spaced doublets with doublet separations of about 2.8 GHz (see below and Table 2). In order to cover several doublets of each species, we surveyed four 5 GHz-wide frequency bands in the 3mm spectrum of IRC+10216. During these observations, we discovered a number of new lines, among which three regular series of doublets which we couldn't assign to any known interstellar or terrestrial molecule. Two of these doublet series were assigned to two new open shell radicals, one of which is C₅H (Cernicharo et al. 1986, Guélin et al. 1986). The evidence for the third series is presented in Fig.1.

It consists of 6 doublets of roughly similar intensity, with centre frequencies almost exactly in the ratio of half integer numbers and with doublet splittings regularly increasing with frequency (Table 1). Despite the high harmonic numbers involved, and despite the high density of weak lines in the spectrum of IRC+10216, the precise harmonic relation between the centre frequencies leaves no doubt that the doublets belong to a single molecule: this relation holds to better than $2 \cdot 10^{-5}$ and the residuals vary in a systematic way. In fact, we had detected only 8 lines when we first noticed the harmonic relation. Later, coming back to the telescope, we were able to find 6 more lines at the predicted frequencies (another line, at 87331 MHz, cannot be observed as it is coincident with the strong N₂J,F=1,3/2,1 \rightarrow 0,1/2,0 line of CCH).

The harmonic relation, which tells us that the centre frequencies are the 26.5th and the 29.5th through 35.5th multiples of a common $2B_{eff} = 2772.5$ MHz frequency, implies

L6

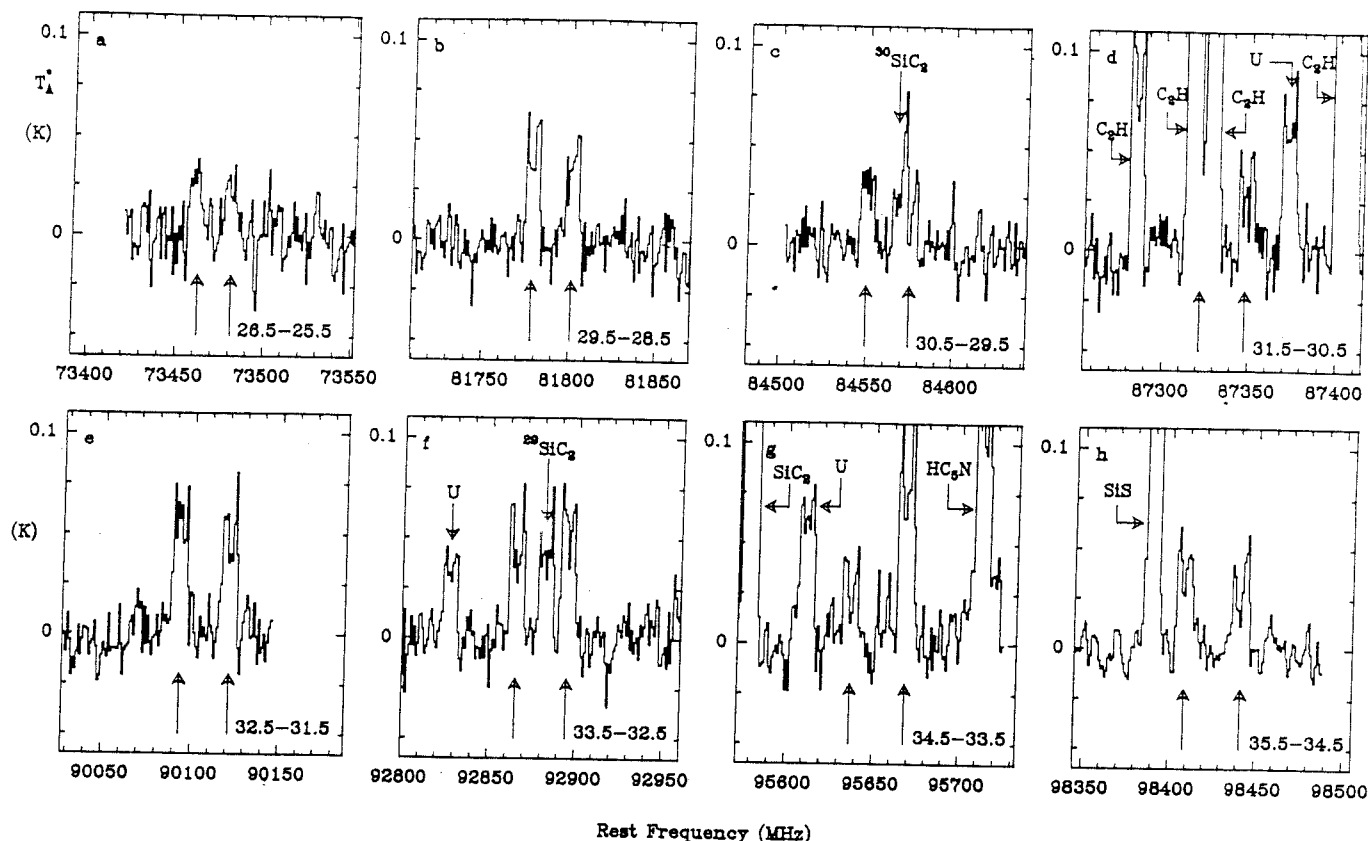


Fig. 1. Eight spectra, with centre frequencies in ratios of half-integer numbers, observed toward IRC+10216 with the IRAM 30-m telescope. The line doublets, indicated by vertical arrows, are rotational transitions of a heavy linear radical in a 2Π state, identified with C_6H . They all belong to the signal sideband. Some of the other lines lie in the image sideband.

that the doublet carrier is linear. As we failed to detect any related doublet between those of Fig. 1 (in particular at half the doublet separation), we know they are successive rotational transitions with half-integer J numbers. This means that the new molecule has an odd number of electrons and, very probably, a 2Π ground state. It also tells us that the effective rotation constant is 1386.2 MHz and that the moment of inertia is close to $364 \text{ amu} \cdot \text{\AA}^2$: a heavy molecule, indeed!

In Table 2, we have compared the rotation constants observed for linear carbon chain radicals with those calculated from standard covalent bond lengths. That both sets of values are so close is a puzzling, but well known result (see e.g. Guélin and Thaddeus 1977, Cernicharo et al. 1986); it gives us some confidence that the constants of C_5N and C_6H can be predicted by this crude method with some accuracy. What is clear, going down the list of Table 2, is that the addition of an extra C atom to the carbon backbone changes the rotation constant by roughly a factor of two. This change is much larger than any one resulting from the substitution of a C atom by an N atom (or an O atom), or from the addition of an

extra H atom, so that, provided the new molecule is composed only of abundant elements (H, C, N and O --this latter being unlikely as it is locked into CO in the envelope of IRC+10216), the knowledge of the rotation constant fixes the number of C,N,O atoms to be six.

There are not many species composed of H,C and N (or even O) having an odd number of electrons and a linear backbone consisting of 6 heavy atoms. The most obvious are C_5N (and its isomer C_4NC) and C_6H . From Table 2, we see that the rotation constants predicted for C_5N and C_4NC seem large with respect to the observed value (although the accuracy of the prediction is not sufficient to rule out these species); the rotation constant of C_6H , on the other hand, is just right. Also on abundance grounds, C_6H stands out as the most attractive candidate: just as C_4H is more abundant than C_3N and $CCNC$, C_6H is likely to be more abundant than C_5N and much more abundant than C_4NC (neither C_2NC , nor even HC_2NC have been detected so far). C_6H would be the obvious choice, if it were not for one point: by analogy to C_4H and C_3N , the radicals C_6H and C_5N are expected to have a 2Σ ground state.

Before discussing in more detail the question of the ground state, let us see if other species could fit the observational data. Besides H, C, N and O, sulfur and silicon have been observed in the envelope of IRC+10216. Sulfur, is observed only in CS and SiS and is probably mostly locked into these two species (just as oxygen is locked into CO and SiO). Silicon, in contrast, is observed in 4, maybe 5 molecules, and is likely to be present in others. Assuming our molecule contains one silicon (or sulfur) atom, it can have the proper moment of inertia only if it also contains 4 (and only 4) second row atoms (probably C or N atoms). For stability reasons, silicon (or sulfur) would be likely to be located at the end of the heavy atom backbone, as indicated by quantum mechanical calculations on smaller compounds. This suggests HC₄Si which, by analogy with C₅H, could have a ²Π ground state (see however Guélin et al. 1986) and for which we derive a rotation constant (1390 MHz) very close to the observed one. Species like NC₃Si, HC₄S or NC₃S would also fit reasonably well, but seem less likely to be abundant.

To help to decide between C₅N, C₆H and a silicon compound, we have searched for the new molecule in the dark cloud TMC1, which is known to be rich in carbon chain molecules and radicals (C₄H and C₅H are there quite strong) and which is so cold that all silicon atoms must be condensed on grains. Because the temperature is low, the 3mm transitions are hardly excited, as they involve rotational levels with energies > 50 K. We have thus searched for a lower transition, namely the J=7.5→6.5 transition, at 20.8 GHz. This low-J transition, besides being easy to excite and yet reasonably strong, has the advantage that its hyperfine structure starts to be resolved in a source like TMC1 which has a low velocity dispersion.

In an open-shell molecule like C₆H, the presence of an unpaired electron and of a nucleus with non-zero spin gives rise to hyperfine structure: each of the two lambda-doubling components of the C₆H J=7.5→6.5 transition are split into 3 lines with relative intensities 1/0.87/0.01. For C₅N, however, the corresponding components are split into 5, because the N nucleus has a spin of 1, and their relative hyperfine intensities are 1/0.87/0.76/0.01/0.01. Therefore, the observation of the hyperfine components and the measurement of the line intensities can, in principle, allow us to distinguish between H- and N-bearing species.

The 20 GHz observations were made with the Effelsberg 100m telescope. The observed profile consists of 4 line components grouped in two sets of two, with intensities in the ratios ≈ 1/0.9 (see Table 3). The center frequency of the 4 lines is 20793.69 MHz and the spacing between the two sets 1.57 MHz, values which agree precisely with the center frequency and lambda-doubling splitting we predict from the fit of the new molecule's 3mm data. Since there are not many lines as strong as 0.4 K in the 1 cm spectrum of TMC1, we are sure that the 4 lines are those we were seeking.

TABLE 1 : LINE PARAMETERS

J _u	J _l	Observ. Frequ. (MHz)	Obs-Calc (MHz)	Split (MHz)	Intensity (K)
source: IRC+10216 (α ₁₉₅₀ = 9 ^h 45 ^m 14.8 ^s , δ ₁₉₅₀ = 13°30'40"; V _{LSR} = -27 km.s ⁻¹)					
35.5	34.5	98441.7 (0.5)	-0.1	32.8	0.035
		98408.9 (0.4)	+0.3		0.04
34.5	33.5	95668.3 (0.6)*		31.7	0.09*
		95636.6 (0.3)	-0.3		0.045
33.5*	32.5	92894.9 (0.3)	0.0	29.7	0.06
		92865.2 (0.3)			0.05
32.5	31.5	90121.4 (0.5)	0.0	28.4	0.055
		90093.0 (0.4)	-0.3		0.05
31.5	30.5	87348.3 (0.5)	+0.4		0.045
		-----			-----
30.5	29.5	84574.5 (0.5)*	0.0	24.6	0.03
		84549.9 (0.4)	+0.2		0.04
29.5	28.5	81801.1 (0.3)	-0.1	23.0	0.04
		81778.1 (0.3)	+0.2		0.05
28.5	27.5	73480.5 (1.0)	-0.7	20.5	0.03
		73460. (1.0)	-2.2		0.035
source: TMC1 (α ₁₉₅₀ = 4 ^h 38 ^m 38.0 ^s , δ ₁₉₅₀ = 25°35'45"; V _{LSR} = 5.8 km.s ⁻¹)					
7.5	6.5	20794.511			0.38
		20794.441			0.37
		20792.944			0.36
		20792.872			0.40

* Blended line components

Taken together, the centimetre and millimetre line frequencies can be fitted accurately by the relation:

$$v(J \rightarrow J-1) = 2B_{\text{eff}}J - 4D_{\text{eff}}J^3 \pm (q_1 J + q_2 J^2) / 2 \quad (1),$$

which is a simplified form of the general relations derived for ²Π molecules by Hill and Van Vleck and Mulliken and Christy (e.g. Townes and Schawlow 1975); relation (1) was shown to fit adequately the rotational levels of C₅H (Cernicharo et al. 1986, Gottlieb, Gottlieb and Thaddeus 1986).

We derive: $B_{\text{eff}} = 1386.2449 (\pm 6 \cdot 10^{-4})$ MHz

$$D_{\text{eff}} = -10.4 (\pm 1) \text{ Hz}$$

$$q_1 = 15 (\pm 4) \text{ kHz}$$

$$\text{and } q_2 = 26.1 (\pm 3) \text{ kHz.}$$

For J as large as 30, fine structure stretching terms are expected to become important even for the Π_{1/2} fine structure state. Hence, although we find that q₂ is larger than q₁, it is not possible to determine from the present data which of the ²Π_{1/2} or ²Π_{3/2} state we have observed.

The detection of the new radical in TMC1 and the strength of the lines strongly supports the case of C₆H. First, it seems to rule out all silicon compounds. Second, it favors C₆H with respect to C₅N, since C₄H is very abundant in that source (a factor of 30 more abundant than C₃N ---Guélin, Friberg and

L 8

Mezaoui 1982): at centimetre wavelengths our 0.4 K lines are second in strength only to those of HC_3N , HC_5N and C_4H ; if they were to arise from C_5N , this species would have to be more abundant than C_3N . Finally, the number of hyperfine components which are observed also strengthens the case for C_6H against C_5N .

Except for its apparent ground state, C_6H stands out in every respect as the best candidate for our new radical. It thus seems reasonable to query whether this ground state has really to be the same as in C_4H . We know, from quantum mechanical calculations (Pauzat and Ellinger, private communication), that the lowest electronic Π states of CCH and C_4H do not lie much higher than the Σ ground state. The energy difference between the ground Σ and the Π state decreases strongly from CCH to C_4H and is expected to change sign for longer members of the $(\text{CC})_n\text{H}$ family. In fact, Pauzat and Ellinger (private communication) find from preliminary RHF calculations that both states are close for C_6H , and that the $^2\Pi_{3/2}$ state lies ≈ 6 kcal/mole below the Σ state.

Additional support for C_6H comes from the value of its permanent dipole moment. This is sensitive to the localisation of the unpaired electron and differs considerably between the Π and Σ states. Pauzat and Ellinger derive from their calculations a large dipole moment ($\mu = 4.3$ D) for the lowest Π state of C_6H , and a small one (0.9 D) for the nearby Σ state; for C_5N they find on the other hand that the Π state has by far the smallest dipole moment: 0.07 D, vs 3.2 D for the Σ state. (The uncertainty in these values should be rather small, since, for a given state, the dipole moment is not sensitive to the final bond length optimisation.) As the line strengths scale with μ^2 , the Π state of C_5N should not be detectable and it seems clear that our $^2\Pi$ radical cannot be C_5N . In contrast, the large μ value of the Π state of C_6H means that this state will be detected preferentially.

TABLE 2: OBSERVED AND CALCULATED ROTATION CONSTANTS (in MHz)

molecule	B_0 (observed)	B_0 (calc.)	$(B_0 - B_{\text{calc}})/B_0$
C_3H	11186	11140	0.4 %
C_4H	4759	4764	0.1 %
C_5H	2395	2377	0.9 %
C_6H	1386 (?)	1388	0.2 %
C_2N	11938	12314	3 %
C_3N	4948	4963	0.3 %
C_4N		2418	
C_5N		1398	

Bond lengths adopted in the calculations are (in Å) :

C—C 1.37; C=C 1.21; C=N 1.16; C—H 1.07;

In summary, we have detected six doublets and two related lines in the millimetre spectrum of IRC+10216. They are successive rotational transitions of the $^2\Pi$ state of a linear radical with a rotation constant $B_{\text{eff}} = 1386$ MHz. This radical has not been observed so far in the laboratory and it is not observed in the molecular source Orion KL. We have detected its $J=7.5 \rightarrow 6.5$ transition in the dark cloud TMC1: each lambda-doubling component of this low- J transition is resolved into 2 hyperfine lines. The rotation constant, the line intensities and the number of hyperfine lines agree with those expected for the free radical C_6H . Contrary to C_4H , this latter is expected from preliminary *ab initio* calculations to have a $^2\Pi$ ground state. Other obvious molecules which could have the right rotation constant are C_5N and HC_4Si , but both are ruled out by our TMC1 observations. Other possible species would be HC_4S or more exotic compounds with cosmically unimportant elements, but none of these seems likely.

The present observational data are so much in favor of C_6H , that we conclude that we have probably detected the hexatriynyl radical. A definitive answer on whether this identification is correct may come from laboratory studies.

We thank F. Pauzat and Y. Ellinger for having communicated to us the preliminary results of their quantum mechanical calculations.

References

- Cernicharo, J., Kahane, C., Gomez-Gonzalez, J., and Guélin, M.: 1986, *Astron. Astrophys.*, 164, L1.
 Gottlieb, C.A., Gottlieb, E.W., and Thaddeus, P.: 1986, *Astron. Astrophys.*, 164, L5.
 Guélin, M., and Thaddeus, P.: 1977, *Ap. J. Letters*, 212, L81.
 Guélin, M., Green, S., and Thaddeus, P.: 1978, *Ap. J. Letters*, 224, L27.
 Guélin, M., Friberg, P., and Mezaoui, A.: 1982, *Astron. Astrophys.*, 109, 2.
 Guélin, M., Cernicharo, J., Kahane, C., and Gomez-Gonzalez, J.: 1986, *Astron. Astrophys.*, 157, L17.
 Kroto, H.W., Heath, J.R., O'Brien, S.C., Curl, R.F., and Smalley, R.E.: 19, *Ap. J.*, in press.
 Thaddeus, P., Gottlieb, C.A., Hjalmarsen, A., Johansson, L.E.B., Irvine, W., Friberg, P., and Linke, R.A.: 1985, *Ap. J. Letters*, 294, L49.
 Townes, C.H., and Schawlow, A.L.: 1975, *Microwave Spectroscopy*, Dover, New York.

Note added in proof:

We have succeeded in detecting in IRC+10216 a new series of doublets arising from the other fine structure state of our new radical. From the analysis of the complete data, we derive the radical's main spectroscopic constants and determine that the transitions reported in this Letter belong to the $^2\Pi_{3/2}$ state (Cernicharo et al. 1987, in preparation).

E. Découverte d'un nouveau radical libre

Lors de la recherche de C_6H , nous avons découvert 3 doublets, dont les fréquences centrales étaient en relations harmoniques entières et dont l'espacement était constant. (Cette découverte fait l'objet de l'article qui suit; depuis, de nouvelles observations nous ont permis de détecter 3 doublets supplémentaires imputables à la même molécule, voir l'Annexe A). Comme nous l'avons mentionné plus haut, ces deux propriétés sont la signature d'une molécule de type doublet Σ . En supposant que la molécule est linéaire, l'ajustement des fréquences observées aux expressions théoriques du type :

$$\nu_{\pm}(N+1 \rightarrow N) = 2 B_0 (N+1) - 4 D_0 (N+1)^3 \pm \gamma/2 \quad (II.11)$$

fournit les valeurs de la constante rotationnelle B_0 (5967 MHz), de la constante de distorsion centrifuge D_0 (3.5 kHz) et de γ (15 MHz), la constante d'interaction spin-rotation.

La relativement grande valeur de D_0 que l'on obtient ainsi, peut suggérer que la molécule est légèrement asymétrique (de type soucoupe), auquel cas, les fréquences expérimentales se mettent approximativement sous la forme :

$$\nu_{\pm}(N+1 \rightarrow N) = 2 (B+C) (N+1) - 4 (D_0 - A b_p^2/8) (N+1)^3 \pm \gamma/2 \quad (II.12)$$

où b_p est le paramètre d'asymétrie de Wang. En supposant pour D_0 une valeur typique de 1 kHz, on trouve que $b_p = -2.5 \cdot 10^{-4}$.

Compte-tenu de la valeur de B_0 (ou de $(B+C)/2$), et en se limitant aux atomes les plus abondants dans IRC+10216, les candidats les plus plausibles sont CCNC, NCSi, HSCC, HSiCC et leurs isomères. Aucune de ces molécules n'a bien sûr été observée au laboratoire et le choix entre elles est délicat.

Dans l'article qui suit, nous examinons les différents critères qui peuvent aider à choisir entre plusieurs molécules :

- accord entre les constantes mesurées et calculées (ce critère dessert CCNC),

- nature de l'état fondamental prédit par les calculs *ab initio* (ils prédisent par exemple que l'état fondamental de HCCS serait un état $^2\Pi$, mais l'exemple de C_6H montre que certaines molécules peuvent constituer des cas limites pour lesquels la précision des calculs *ab initio* peut être critique).

- abondance probable de la molécule (nous avons utilisé cet argument en défaveur de HSCC, deux molécules soufrées seulement, CS et SiS étant, à l'époque, détectées dans IRC+10216; depuis, deux autres espèces, relativement abondantes, CCS et C_3S , ont été identifiées dans cette enveloppe (cf. Saito *et al.*, 1987, et Yamamoto *et al.*, 1987, ainsi que l'article sur l'abondance du soufre dans IRC+10216 qui figure dans le paragraphe F), si bien que l'argument perd de sa force.

En conclusion, la nature exacte de la molécule responsable de 6 doublets Σ dans le spectre d'IRC+10216 n'est pas totalement élucidée. Cette espèce n'a pas été détectée dans le nuage chaud Orion-KL. Comme dans le cas de C_6H , sa détection dans le nuage froid TMC1 permettrait probablement de résoudre le problème (observation de la structure hyperfine de la molécule et élimination des candidats silicés). En dernier recours, c'est bien sûr l'observation de la molécule au laboratoire qui fournira la confirmation ultime de la nature de la molécule.

Astron. Astrophys. 157, L17-L20 (1986)

*Letter to the Editor***A new free radical in IRC+10216**M. Guélin^{1,2}, J. Cernicharo^{1,3}, C. Kahane³, and J. Gomez-Gonzalez^{1,2}¹ IRAM, Domaine Universitaire de Grenoble, Voie 10, F-38406 St. Martin d'Hères, France² Av. Divina Pastora 7, E-Granada, Spain³ Groupe d'Astrophysique, Université de Grenoble, CERMO, BP 68, F-38402 St. Martin d'Hères Cedex, France

Received November 26, 1985; accepted January 28, 1986

ABSTRACT

We report the discovery of a new "non terrestrial" molecule in the envelope of the carbon star IRC+10216. This molecule is linear or slightly asymmetric and must have an odd number of electrons; its electronic ground state is very probably split by spin-rotation interaction, i.e. must be $^2\Sigma$ if the molecule is linear. The rotation and spin-doubling constants are found to be 5966.8 MHz and ± 15.1 MHz, respectively. The most likely candidates for such a radical are HSiCC (or its isomer HCCSi) and HSCC.

Keywords: molecules - stars: circumstellar matter

The envelope of the infrared star IRC+10216 is a prime site for the study of reactive carbon or silicon compounds. The free radicals C_2H , C_3H , C_4H , and C_5N have indeed been found in this source prior to being observed in a spectroscopic laboratory, and the linear carbon chain molecule HC_3N , which has been discovered in IRC+10216, has not yet been seen in the lab. This envelope is also the strongest source of SiCC emission in the sky (Thaddeus et al., 1984).

The discovery of these species was accidental, as was that of most reactive interstellar molecules. It arose from the observation of millimeter lines with a characteristic pattern which couldn't be assigned to any known interstellar or terrestrial species. In the cases of C_3N and C_4H (Guélin and Thaddeus 1977, Guélin et al. 1978) the pattern consisted of doublets of equal splittings, whose center frequencies were in a simple ratio of each other. This signature was specific enough to show that the line carrier was a linear molecule in a $^2\Sigma$ state, composed of four atoms consisting of second row elements. In a carbon star where all but a few of the observed molecules are composed of C, N and H, these properties pointed to only two likely molecules, the cyanoethynyl and the butadienyl radicals. In this Letter we report the discovery of a new molecule with a similar line pattern.

The evidence for the new molecule lies in the three doublets of Fig. 1. We have detected the two upper doublets while searching for C_3N , another linear molecule with a $^2\Sigma$ ground state. These doublets, which have equal splittings and frequencies in the ratio 9/8, seemed exactly what we were looking for. If they belonged to the $N=36-35$ and $32-31$ transitions of C_3N , the frequencies of the other rotational transitions would be easy to find. We failed however to detect between 90 and 107 GHz any other doublet harmonically related in frequency: we searched unsuccessfully for the $30/32$ th (which is also the $15/16$ th, see Fig. 2b),

$33/32$ and $35/32$ th harmonics of 95.461 GHz, as well as for its $22/24$ th, $23/24$ th and higher order harmonics. On the other hand, we readily detected the third doublet of Fig. 1 at exactly $7/8$ th of 96.461 GHz, confirming that the accurate match between the first lines was not a chance coincidence.

The observations were made with the IRAM 30-m telescope at Pico Veleta, Spain. The telescope was equipped with a new 3-mm SIS receiver with a DSB temperature of about 100 K. The receiver was tuned for the best DSB performances, and the signal-to-image gain ratio was checked after each tuning by observing strong lines in IRC+10216 or Orion-KL, with and without an image sideband rejection filter. This allowed us, while doubling the covered frequency range, to make sure that no line was missed due to accidental rejection of one of the sidebands. The temperature scale was frequently calibrated by successively observing a cold load, a room-temperature load, and the sky; the atmospheric absorption was estimated in both sidebands with the help of an atmospheric model and found to be almost the same, at least below 110 GHz. During the observing, the sky was clear and the atmospheric opacity below 110 GHz was typically $\approx 0.07-0.10$, so that corrections anyway were small. The main-beam efficiency (at the receiver window, including all ohmic and spillover losses in the various reflections) was measured to be $\approx 60\%$. The temperatures in Fig. 1 and Table 1 (denoted T_A) are single sideband antenna temperatures reported above atmosphere. The observing procedure was to subtract from each 30 s on-source observation two 15 s off-source observations made just before and after. This procedure yielded most of the time impressively flat baselines. Only first-degree polynomials have been subtracted from Figs. 1 and 2.

Owing to the high sensitivity of the observations and to the DSB observing mode, we had to worry about line confusion before deriving accurate lines intensities or frequencies. In the ≈ 9 GHz frequency range surveyed, we have observed at least 80 lines. They cover $1/6$ th of the observed spectrum, once the two sidebands are folded; the chances of accidental line blends are thus high. An illustration of this is given by Fig. 1 and by Fig. 2a, which presents the same doublet than Fig. 1a observed with a different center frequency. The low frequency component of this doublet (Fig. 2a) appears more intense than its counterpart as it falls at only 1. MHz of the weak $J=6-5$ $Si^{33}S$ line. (The intensity of the $6-5$ $Si^{33}S$ line is known to be ≈ 0.03 K from observations of the $J=5-4$ transitions - see Fig. 2b). The high frequency component of the lower doublet (Fig. 1c) is partly blended with an unidentified line from the signal sideband.

Send offprint requests to: M. Guélin (French address)

L18

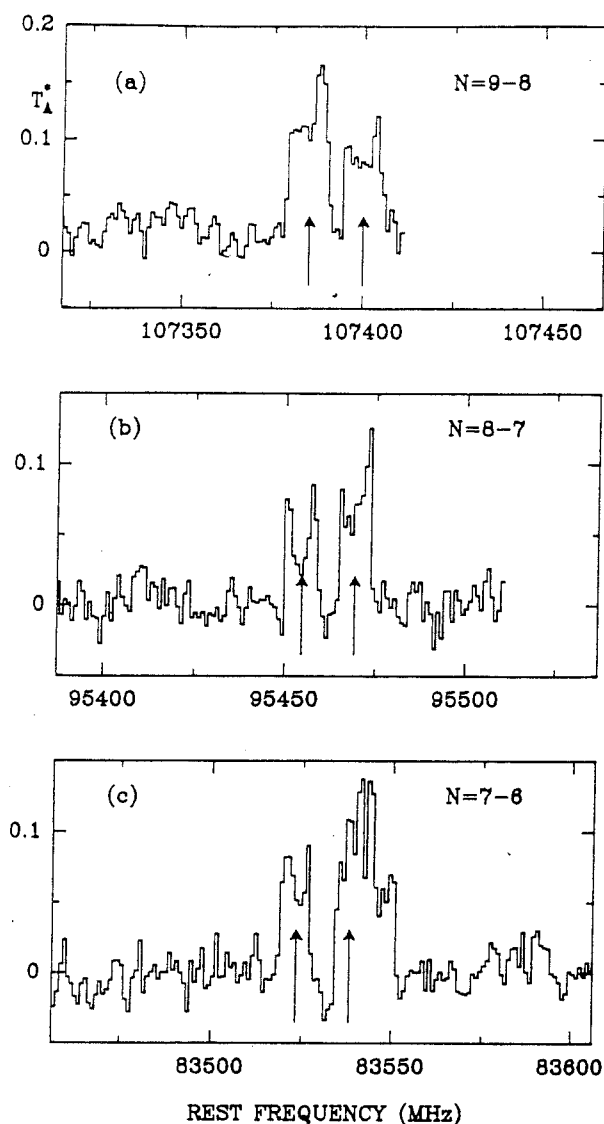


FIGURE 1: The three doublets observed in IRC+10216 with the IRAM 30-m telescope. The spectral resolution is 1 MHz. The frequency scale has been calculated for a source velocity $V_{lsr} = -27 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$. Baselines of order 0 or 1 were subtracted from the original data. The arrows indicate the position of the six line components, as derived from the values of B_0 and D_0 given in the text. The right component in Fig 1c is the blend of three lines (see text).

Fortunately, the lines in IRC+10216 present clear-cut edges and have exactly the same velocity width, so that half-blended lines can be resolved when the signal-to-noise ratio is good. So, the high frequency component of Fig 1c is readily resolved into three 8 MHz wide, U-shaped lines of unequal strengths. The lowest and strongest of these lines is found to have a rest frequency of $83538.0 \pm 0.3 \text{ MHz}$ and to lie 15.1 MHz above the low frequency component (Table 1). This 15.1 MHz splitting, within the small uncertainties ($< 0.5 \text{ MHz}$), is equal to that in the 95.5 and 107.4 GHz

doublets (14.9 and 15.2 MHz, respectively).

The equality of the three splittings and the very good low order harmonic relation between the doublet center frequencies (the 1.7 MHz difference between the harmonic and the actual frequencies is in the direction expected for centrifugal distortion) leaves practically no chance that the six lines of Fig 1 could be unrelated. These lines have about the same intensities and stand up among the strongest of our unidentified lines. They must arise from the same molecule. But which molecule is it?

As discussed for C_3N by Guélin and Thaddeus (1977), a line pattern such as that of Fig 1 is specific enough to tell us much about its carrier. The constancy of the doublet splitting and the apparent absence of any other line component (see Fig 1b) strongly suggest that the splitting results from electron spin-rotation interaction and that the molecule has an odd number of electrons. Other fine or hyperfine line splittings in molecules, just as l-type doubling, are known to vary at least as the first power of the rotational quantum number (e.g. Townes and Schawlow 1975). Moreover, the simple relation between the doublet center frequencies most certainly implies that we are dealing with a linear molecule, a slightly asymmetric top, or a symmetric top. A symmetric top is unlikely, as our lines appear free of K-structure broadening; K-structure is clearly observed in IRC+10216 for the lines of CH_3CN , the only symmetric top detected in this source (Fig 2c). Since we didn't detect any intermediate doublet, we know that we observed the $N=9-8$, $8-7$ and $7-6$ rotational transitions and can determine the molecule's rotational constants. Assuming that the molecule is linear, we derive :

$$B_0 = 5966.82 \pm 0.05 \text{ MHz},$$

and

$$D_0 = 3.5 \pm 0.50 \text{ KHz}.$$

The spin-doubling constant is $|\gamma| = 15.1 \pm 0.2 \text{ MHz}$. If the molecule is slightly asymmetric, we have:

$$(B+C)/2 = 5967 \text{ MHz},$$

with an asymmetry parameter (e.g. Townes and Schawlow, *ibid*):

$$|b_p| < 3 \cdot 10^{-4}.$$

To our knowledge, there is no known astrophysical or terrestrial molecule with such spectroscopic constants. Known molecules with similar rotational constants are (see e.g. Demaison et al. 1974, 1982) OCS (6080 MHz), NCS (6100 MHz), $HNCS$ (5860 MHz) and H_2CCS (5612 MHz), all of which have three heavy atoms, and C_3N (4948 MHz), which has four heavy atoms. If we are dealing with a species consisting only of cosmically abundant elements, then any linear molecule not composed either of two second row and one third row atoms, or of four second row atoms, would be far too heavy or too light to have the proper rotational constant. For a slightly asymmetric top molecule, it should have a linear backbone of three heavy atoms (including one of the third row) plus 1 or 2 hydrogen atoms.

As the molecule has an odd number of electrons and its ground state is split by spin-rotation interaction, we are not left with very many species. Restricting ourselves to elements found in other interstellar molecules (H , C , N , O , S and Si) and ignoring the ions, we have $CCNC$, $HCCS$, $HCCSi$, $NCSi$ and their isomers as obvious candidates.

$CCNC$, an isomer of C_3N , may seem appealing as many

carbon-nitrogen chain molecules are observed in IRC+10216 and, in particular, as C_3N is abundant in that source. It is predicted to be linear and to have the correct ($^2\Sigma$) ground state (Wilson 1978). The line splitting for CCNC is expected to be roughly the same than that of C_3N (18.7 MHz), in agreement with what is observed. On the other hand, the rotation constant of CCNC, estimated by Wilson (1978) from Hartree-Fock calculations, seems too low (5458 MHz or 8.5% below the observed value). It should be noted, nevertheless, that Hartree-Fock calculations are ill-suited for open-shell systems and that similar calculations on the simpler CCN radical underestimated B_0 by as much as 5% (Green 1980). The distortion constant D_0 that we derive (the minimum allowed by our data for a linear molecule is 2.5 kHz) is at least a factor of 3 larger than that of C_3N . Even though this difference is not conclusive (D_0 should scale as B^3 and the C-N bond-stretching frequency in CC-NC must be smaller than the C-C one in CC-CN), atop of the too large B_0 it leaves little hope that CCNC is the species sought. If the B and D values of the new molecule appear at the limit of those possible for CCNC, they are probably too large for any other open-shell molecule with four heavy atoms. If it is not CCNC, the new molecule must then contain sulfur or silicon.

TABLE 1

observed rest frequency (MHz)	obs-calc* (MHz)	intensity (K)
107399.8 (.4)	-0.1	0.11
107384.6 (.3)	-0.2	0.12 ^b
95469.3 (.2)	-0.1	0.11
95454.4 (.3)	0.1	0.09
83538.0 ^t (.5)	-0.1	0.11 ^b
83522.9 (.3)	-0.1	0.10

notes:

* rest frequencies have been calculated for a source Vlsr of -27 km s^{-1} (estimated from the lines of ^{13}CS , CCH and C_2H , observed with a resolution of 100 kHz); the 95.5 GHz doublet is also present in the CCH spectrum of Lucas et al. (1986) who derive frequencies very close to ours.

+ Calculated frequencies assume a linear structure with $B=5966.820 \text{ MHz}$, $D=3.57 \text{ kHz}$, and $\gamma=15.1 \text{ MHz}$.

b line intensities are estimated from the average of the two peaks (one peak for the blended components denoted by b).

t derived from the low frequency edge of the line, assuming a line width of 8 MHz, (which correspond, after scaling in frequency, to the width of the CCH lines)---see text.

From the examples given above, it is clear that a molecule like NCS, if it were not for its $^2\Pi$ ground state, would be very close to what we are seeking. HCCS, or its isomer HSCC, which have the same weight as NCS, must also have about the correct rotation constant. From the geometries of H_2CCS and HSCCH , we derive $(B+C)/2=6025 \text{ MHz}$ for a bent HCCS and 6100 MHz for HSCC. Cooper (1981), however, finds from SCF ab-initio calculations that the most stable form of HCCS, like for NCS, is a $^2\Pi$ linear state. Its rotational transition frequencies should then be half-integer multiples, and not as we observe integer multiples, of a common $2B$ frequency. In any case the linear HCCS has been studied in the lab (Krishnamachari and Ramsay

1981) and found to have a rotation constant smaller than our B_0 . HSCC, on the other hand, is certainly bent on the S atom and must behave spectroscopically like a $^2\Sigma$ molecule, hence could well fit our data. Its main drawback (as well as that of an hypothetical bent HCCS with a higher energy) as the carrier of the new doublets is that it contains sulfur. Only two sulfur molecules have been detected so far in IRC+10216: CS and SiS. H_2S , H_2CS , HNCS , SO , OCS and HCS^+ , have been searched for, but not seen, and we couldn't find any trace of H_2CCS .

The large abundance of SiS, with respect to CS, and the observation of strong SiCC lines, show that silicon is relatively abundant in IRC+10216 and could well be a constituent of the new radical. Plausible silicon compounds are HCCSi , HSiCC and SiCN . Using standard bond lengths and angles, we get respectively for these species $B = 5700$, 5900 and 6000 MHz , assuming they are linear, and $(B+C)/2 = 5900$ and 6050 MHz for HCCSi and HSiCC , if the H atom is outside the SiCC axis. In spite of these molecules' analogy with HCCC and CCN, which both have a linear $^2\Pi$ ground state, their nature and geometry is hard to guess. It is well known that analogous silicon and carbon compounds often have different structures and ground states (see e.g. C, and SiCC, Grev and Schaefer 1984). If linear, any of these molecules may well have a $^2\Sigma$ ground state and HSiCC is likely to be bent on the Si atom; in both cases the molecules could fit the data.

We have seen that the distortion constant of the new molecule, assuming it is linear, is relatively large. This provides some evidence that the molecule may actually be a slightly asymmetric top. The asymmetry in a near prolate top introduces a displacement of the rotational energy levels which, for the $K=0$ levels and large N, behaves like that caused by centrifugal stretching in a linear molecule. The correction term which adds to D_0 is then $= -A \cdot b^2/8$, where $b = (C-B)/(2A-B-C)$ is the molecule asymmetry parameter. Assuming $D_0 = 1 \text{ kHz}$, as for HNCS, we derive $b = -2.5 \times 10^{-1}$, an asymmetry a bit larger than that of HNCS^p, but quite in the range expected for HSiCC or HSCC, which have a longer H-X bond length. A better determination of the line frequencies would be needed to make the argument conclusive.

If they seem the most probable, the molecules discussed above are certainly not the only possible ones as the carrier of our three doublets. We have not considered ions on the grounds that they are unimportant in IRC+10216, as shown by the low HCO^+/CO abundance ratio (Lucas et al. 1986). Likewise, we ignored the molecules containing unimportant elements as none is observed in interstellar or circumstellar clouds (with the possible exception of chlorine). It is conceivable that the new radical is one of such species. A species slightly lighter than ClCCH ($B=5684 \text{ MHz}$, Demaison et al. 1982), such as ClCC for example, would fit perfectly.

In summary, we have detected in the envelope of the carbon star IRC+10216 three doublets which, because they have the same intensity and the same splitting, and because their frequencies are almost exactly in the ratio 7/8/9, must belong to the same molecule, as a matter of fact a radical: it has an odd number of electrons and must be linear or be a slightly asymmetric top; its asymmetry parameter is found smaller than 3×10^{-4} . Its ground state must be split by spin-rotation interaction. The moment of inertia is precisely determined and implies that the new molecule is composed of either three, or four heavy atoms. These

L20

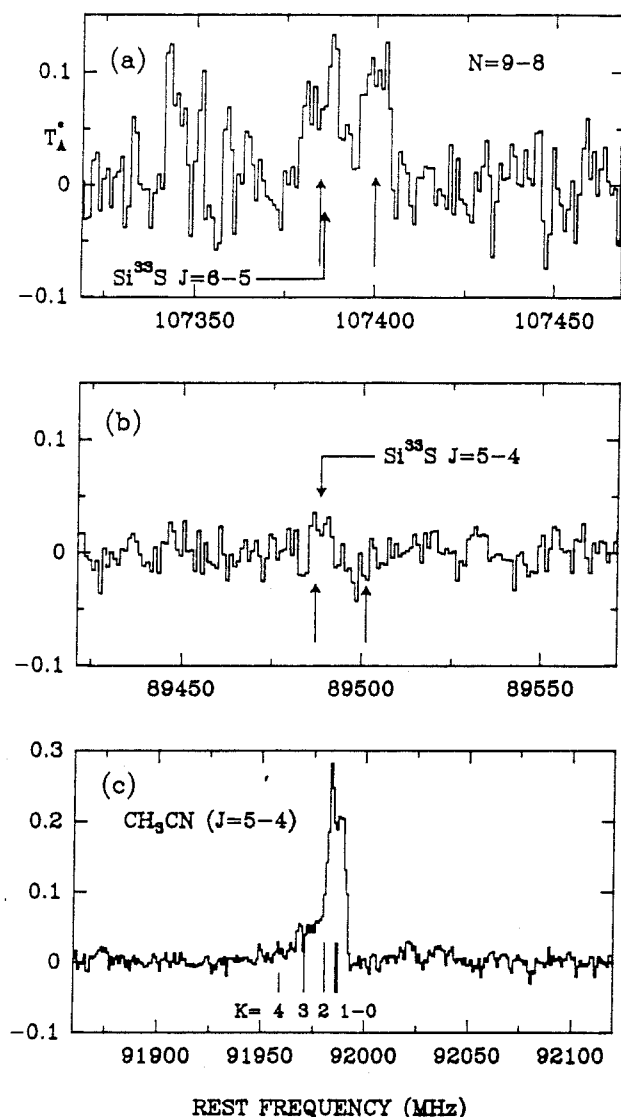


FIGURE 2: Three relevant spectra observed with the IRAM 30-m telescope towards IRC+10216. The frequency resolution is 1 MHz. Fig. 2a: the same doublet as in Fig 1a, observed with a different local oscillator setting. The left component is blended with a weak line, which is the 6-5 transition of Si^{33}S . Fig 2b: the 5-4 transition of Si^{33}S and the position where a fourth doublet identical to those of Fig 1 would lie, if these doublets were transitions of quantum number 14, 16 and 18 (or 28,32,34) and not 7, 8 and 9. Fig 2c: K-splitting in the 5-4 rotational transition of CH_3CN . A "rotation" temperature of $\approx 20-40$ K can be derived from the relative intensity of the K components.

HSiCC and, to a lesser degree its isomer HCCSi and NCSi , seem the most likely to have the proper abundance and the correct spectroscopic properties, but very little is known about their actual structure.

An astronomical test which could help to decide among these or other molecules, would be the observation of more rotational transitions. The detection of a low-lying transition could allow resolution of the hyperfine structure and thus a check on whether it arises from hydrogen or nitrogen (e.g. Guélin et al. 1982). It would also provide, just as the detection of a higher rotational transition, a better determination of $(D-A \cdot b^2/8)$ and allow us to decide whether or not the molecule has an H atom off its axis and to which atom (i.e. first or second row) this hydrogen is bound. The best source for searching a low transition of HSCC could be the dark cloud TMC1. Since we didn't detect the new molecule in Orion-KL, IRC+10216 remains the best object for the observation of higher transitions. From the theoretical side, an evaluation of the structure and dipole moment of the proposed species would be most valuable.

Acknowledgements

We would like to thank G. Bertier, J.L. Destombes, C.H.F. Dierksen, Y. Ellinger, A. Omont, F. Pauzat, and R. Subra for helpful discussions, and the IRAM Granada staff, particularly H. Hein and S. Navarro, for their assistance during the observations.

REFERENCES

- Cooper, D.L.:1981, Chem. Phys. Letters **81**, 479.
- Demaison, J., Huttner, W., Starck, B., Buck, I., Tischer R., Winnewisser, M.:1974, Landolt-Bornstein, II/6; Springer. Verlag.
- Demaison, J., Dubrulle, A., Huttner, W., Tiemann, E.:1982 Landolt-Bornstein, II/14; Springer-Verlag.
- Green, S.:1980, Ap. J. **240**, 962.
- Grev, R.S. and Schaefer, H.F.:1984, J. Chem. Phys. **80**, 3552.
- Guélin, M., and Thaddeus, P.: 1977, Ap. J. Letters, **212**, L81.
- Guélin, M., Green, S., and Thaddeus, P.:1978, Ap. J. Letters, **224**, L27.
- Guélin, M., Friberg, P. and Mezaoui, A.:1982, Astron. Astrophys., **109**, 23.
- Krishnamachari, S.L.N.G. and Ramsay, D.A.:1981, Discuss. Faraday Soc., **71**, 205.
- Lucas, R., Omont, A. Guilloteau, S., and Nguyen-Q.-Rieu:1986, Astron. Astrophys. **154**, L12.
- Thaddeus, P., Cummings, S.E. and Linke, R.A.:1984, Ap. J. Letters, **283**, L45.
- Townes, C.H., and Schawlow, A.L.:1975, Microwave Spectroscopy, Dover Public. Inc. New York.
- Wilson, S.:1978, Ap. J., **220**, 363.

properties, plus the chemical characteristics of the source, notoriously deficient in oxygen and in charged species, leave only a few likely candidates. The isocyanoethynyl radical, CCNC , is predicted to have a too large moment of inertia. HSCC could have the right moment of inertia, but hardly seems abundant enough.

F. L'abondance du soufre dans IRC+10216

Le soufre a longtemps été considéré comme une espèce peu abondante dans l'enveloppe de l'étoile carbonée IRC+10216. Deux molécules soufrées seulement y avaient été détectées, SiS et CS, dont on pensait qu'elles contenaient la totalité du soufre disponible. Ce point de vue a été sérieusement remis en cause d'abord par la détection d'une raie de H_2S (Lucas, 1987; Omont *et al.* 1989) puis, surtout, par la détection de nombreuses raies appartenant à deux nouvelles molécules soufrées, CCS et C_3S . Leur identification a été faite par Saito *et al.* (1987) et Yamamoto *et al.* (1987) à partir d'observations au laboratoire et de la détection, dans le nuage sombre TMC1, de raies de rotation de ces deux espèces. Nous avons, de notre côté, détecté de nombreuses transitions de chaque molécule, lors de la recherche d'autres espèces, dans l'enveloppe IRC+10216 (voir l'Annexe A).

L'article qui suit rassemble les données que nous avons recueillies sur les molécules soufrées dans IRC+10216. Les températures de rotation et les densités projetées des molécules ont été déduites des intensités intégrées des raies, selon la méthode exposée précédemment. Les rapports d'abondance CCS/CS et $\text{C}_3\text{S}/\text{CS}$ sont similaires aux rapports $\text{HC}_3\text{N}/\text{HCN}$ et $\text{HC}_5\text{N}/\text{HCN}$ (la densité projetée de C_3S reportée dans l'article qui suit est surestimée d'un facteur 2, le moment dipolaire utilisé pour la calculer ayant été pris égal à 2.6 D, au lieu de 3.6 D). Il n'est pas impossible qu'un mécanisme analogue à celui de la formation des cyanopolyynes, par réactions ion-molécule à partir de C_2H_2 , s'applique à la formation des chaînes soufrées, à partir de CS. Il pourrait être intéressant, pour tester cette hypothèse, d'effectuer des cartographies de raies d'émission de CCS et C_3S , afin de vérifier si, comme il semble pour C_2H (Bieging et Rieu, 1988) ces molécules ne se forment qu'à distance du centre de l'enveloppe. Cette étude sera cependant rendue assez délicate par la faiblesse des raies concernées.

Letter to the Editor

Sulfur in IRC + 10216

J. Cernicharo¹, M. Guélin², H. Hein³, and C. Kahane¹¹ Groupe d'Astrophysique de l'Observatoire de Grenoble, Université Scientifique et Médicale de Grenoble, CERMO, BP 68, F-38402 St. Martin d'Hères Cedex, France² IRAM, Domaine Universitaire de Grenoble, Voie 10, F-38406 St. Martin d'Hères, France³ IRAM, Divina Pastora No. 7, Granada, Spain

Received April 21, accepted May 12, 1987

SUMMARY

We report the detection of 12 lines of C_2S and 11 lines of C_3S in IRC+10216. These lines, which sample a large range of rotational energies, yield accurate values of these species' column densities. The abundances of C_2S and C_3S are compared to those of other sulfur molecules and carbon chains. C_2S and C_3S are a factor of ≈ 40 less abundant than CS, but about as abundant as C_2H and C_3H , two carbon chain radicals of similar weight.

The detection of these molecules and of H_2S shows that sulfur chemistry in circumstellar envelopes is more interesting than previously thought.

keywords: radio lines: molecular; stars: circumstellar matter.

The envelope of the star IRC+10216 is rich in carbon molecules, but notoriously poor in oxygen-bearing compounds. Heavy cyanopolyynes ($H(CC)_nCN$ $n=2-5$), and acetylenic radicals (C_nH $n=2-6$) are abundant there, whereas the simplest oxygen molecules, besides CO and SiO, are not even detected. Until now, the wealth of carbon and nitrogen compounds was thought to have no sulfur counterpart; only two diatomic species, CS and SiS, were detected and the sulfur chemistry seemed as limited as that of oxygen. This viewpoint is now obsolete. Following the identification in IRC+10216 of a radical which could be HSCC (Guélin et al. 1986) and the detection of H_2S (Lucas et al. 1987), we report in this Letter the detection of two heavy sulfur compounds, C_2S and C_3S .

The observations, made in May, October, and December 1986, were part of a general survey of the 2mm and 3mm spectrum of IRC+10216 with the IRAM 30m telescope. The observing procedure and telescope characteristics have been described already (e.g. Guélin et al. 1986). Most of the observing was made in double sideband (DSB) mode, so that a larger frequency range could be covered. Typically, the DSB receiver temperature was 100 - 150 K (200K above 160 GHz), with a slight imbalance ($\approx 4/3$ to $3/2$) in favor of the lower sideband. The telescope beam and surface efficiencies (≈ 0.55 and 0.45 ,

respectively) are roughly similar at 2mm and 3mm; the half power beamwidth (HPBW) varies from 25" at 90 GHz to 16" at 160 GHz.

The survey has revealed a large number of new lines, many of which could not be assigned to any molecule with known spectroscopic constants. Among these are the lines presented in Table 1 and 2 and Fig. 1 and 2.

The 11 lines of Table 1 and Fig. 1 have harmonically related frequencies. A least-squares fit, using the standard relation $\nu = 2BJ - 4DJ^3$, yields $B = 2890.387$ MHz and $D = 0.24$ KHz, two values so close to those expected for C_3S and C_3Si , that we concluded, when we noticed the lines, that we had observed one of these two species. Our B and D values agree with those derived recently for C_3S from laboratory measurements (Yamamoto et al. 1987); the identification of C_3S in IRC+10216 is now certain.

TABLE 1 : C_3S line parameters

$J' - J$	Observed Frequency (MHz)	$\int T_A^* dv$ (K.km.s ⁻¹)
13 - 12	75148.09 \pm 0.5	2.3 \pm 0.4
15 - 14	86708.72 \pm 0.3	2.4 \pm 0.7
16 - 15	92488.78 \pm 0.3	2.2 \pm 0.3
17 - 16	98268.43 \pm 0.3	2.2 \pm 0.3
18 - 17	104048.37 \pm 0.3	2.1 \pm 0.3
19 - 18	109828.42 \pm 0.5	2.7 \pm 0.4
23 - 22	132945.75 \pm 0.7	1.4 \pm 0.4
24 - 23	138725.29 \pm 0.3	1.6 \pm 0.3
25 - 24	144504.88 \pm 0.4	1.4 \pm 0.3
27 - 26	156062.70 \pm 0.4	1.0 \pm 0.3
29 - 28	167619.63 \pm 0.7	1.0 \pm 0.5

Send offprint requests to: J. Cernicharo

L10

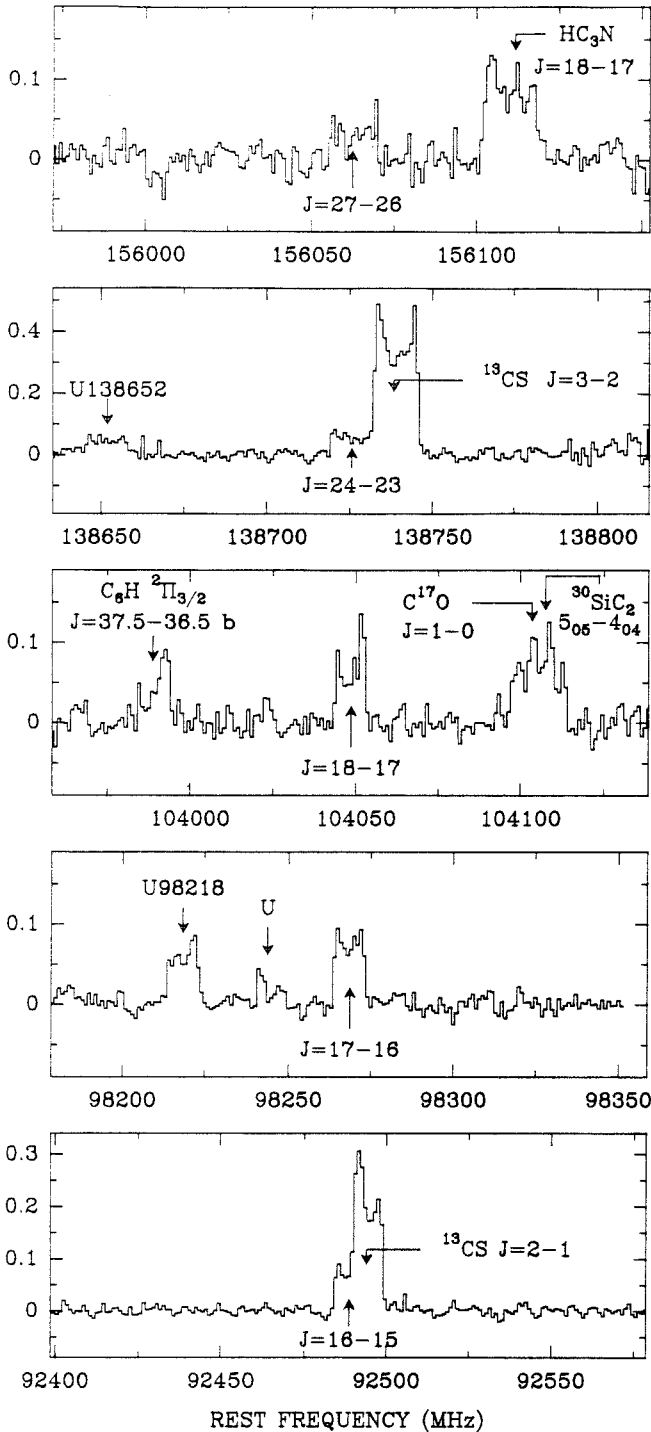


Figure 1: Five spectra, observed with the IRAM 30m telescope toward IRC+10216, showing five rotational transitions of C_2S . The four upper spectra were observed in the DSB mode, the lower with a 15 dB rejection of the image sideband. The ordinate scale, T_A^* , the effective antenna temperature above the atmosphere, refer to the sideband of the C_2S lines. The $C^{17}O$ line, the HC_3N line, the $^{30}SiCC$ line, and some of the U lines lie in the image sideband and are not to scale. The spectral resolution is 1 MHz.

Saito et al. (1987) have observed a related species, C_2S , in their laboratory. They measured the rotational spectrum of this radical and were able to assign several lines of TMC1 and SgrB2 to it. We have covered in our IRC+10216 spectral survey the frequencies of 14 transitions of C_2S and detected the 12 transitions of lower energy (see Table 2 and Fig. 2). We have also covered the frequency of the $1_{1,0}+1_{0,1}$ transition of H_2S (168.762 GHz), as well as several transitions of H_2CS , H_2C_2S , CS , NS , SiS , SO , SO_2 , OCS , CCO and C_3O . There is a weak line at the frequency of the $H_{2,3}$ line (see Lucas et al. 1987); except for CS and SiS (Kahane et al. 1987), none of the other molecules is detected.

From the lines in Table 1 and 2, which sample a large range of rotational energies (15-60 K for CCS , 25-120 K for C_2S), it was possible to calculate the rotational level populations and to derive with some accuracy the column densities of C_2S and C_3S by assuming the molecules' dipole moments; we have adopted here the moment values calculated by Murakami (1987): 2.9 D for C_2S and 2.6 D for C_3S .

TABLE 2 : C_2S line parameters

$J' N' - J N$	Observed Frequency (MHz)	$\int T_A^* dv$ (K.km.s ⁻¹)
7 6 - 6 5	81505.11 ± 0.2	4.0 ± 0.3
6 7 - 5 6	86181.20 ± 0.2	1.6 ± 0.2
7 7 - 6 6	90686.00 ± 0.3	3.0 ± 0.3
8 7 - 7 6	93870.10 ± 0.2	3.4 ± 0.2
7 8 - 6 7	99866.50 ± 0.2	1.8 ± 0.2
8 8 - 7 7	103640.12 ± 0.2	2.3 ± 0.2
9 8 - 8 7	106347.40 ± 0.2	3.1 ± 0.4
8 9 - 7 8	113410.18 ± 0.5	2.1 ± 0.3
11 10 - 10 9	131551.80 ± 0.2	3.4 ± 0.3
10 11 - 9 10	140180.09 ± 1.0	1.8 ± 0.4
12 12 - 11 11	155454.20 ± 1.0	1.3 ± 0.5
13 12 - 12 11	156981.30 ± 1.0	1.7 ± 0.3
13 13 - 12 12	168406.80	≤ 1.1
14 13 - 13 12	169753.41	≤ 1.1

In Fig. 3, we have plotted the log of the C_2S and C_3S column densities per substate, $N_u / (2J+1) = 3kW/8\pi^3 J v u^2$, as a function of the upper level energy, $E_u = (h/k)BJ(J+1)$. The velocity - integrated brightness temperature, $W = \int T_B dv$, has been derived from the antenna temperatures listed in Table 1 by dividing $\int T_A^* dv$ by $0.6(1 - \exp(-20.8/HPBW)^2)$. Here, the factor 0.6 is the ratio of the main beam to forward beam efficiencies, HPBW is the

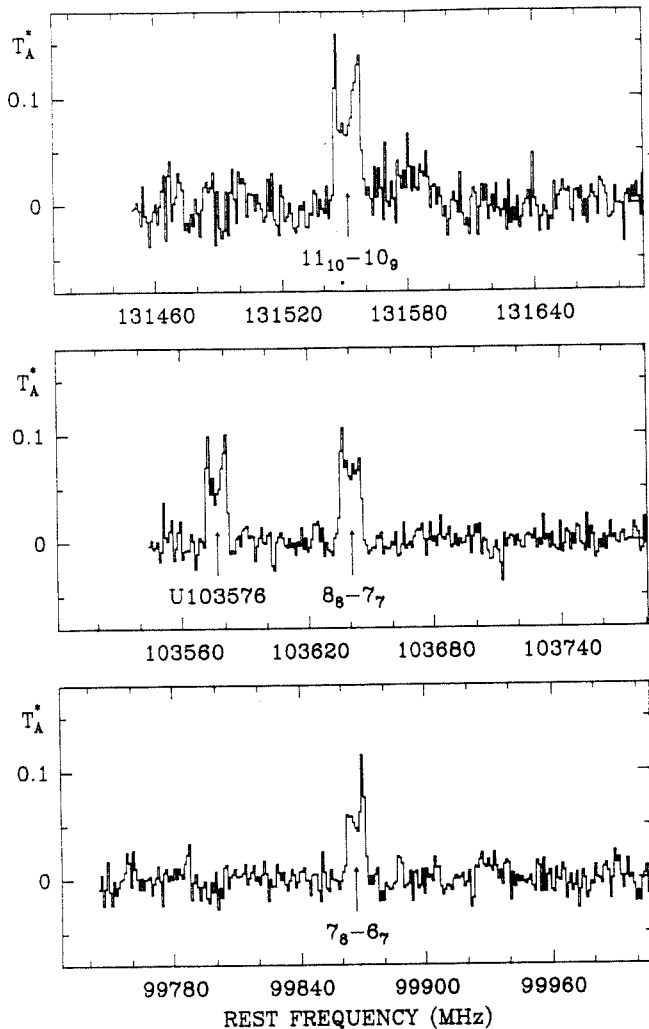


Figure 2: The $11_{10}-10_9$, 8_8-7_7 , and 7_6-6_7 , rotational transitions of C_2S .

half-power main-beam width expressed in arc seconds and $(1-\exp(-(20.8/HPBW)^2))$ is the beam dilution factor for a source of uniform brightness and of diameter 25". Such a model of the source is a crude approximation of the C_2H brightness distribution derived by Guilloteau et al. (1987) from 30 m telescope data.

The C_2S data of Fig. 3 follow a straight line with slope $0.434/T_{rot} = 0.031 \text{ K}^{-1}$. This relationship shows that, within the 10 K - 50 K energy range, the rotational level population is thermalized at a temperature $T_{rot} = 14 \pm 3 \text{ K}$. The C_2S data can also be fitted by a straight line, but with a larger slope; we find for this molecule $T_{rot} = 28 \pm 4 \text{ K}$ for the levels between 25 and 120 K. The temperatures derived from Fig. 3 are not very sensitive to the source size, as long as this latter is larger than 15"; T_{rot} for C_2S varies from 13 to 17 K as the source size increases from 15 to 40", and the corresponding values for C_3S are 25 and 33 K. That $T_{rot}(C_3S) > T_{rot}(C_2S)$ is not surprising. A similar increase is observed between C_2H ($T_{rot} = 14 \text{ K}$), C_3H ($\approx 20 \text{ K}$) and C_4H (30 K, see e.g. Cernicharo et al. 1986, 1987).

It probably results from enhancement in radiative excitation, since the larger species, which have lower bending energies, are more easily excited by the infrared radiation of the surrounding dust.

Assuming that a single rotation temperature, $T_{rot} = 14 \text{ K}$, holds for all the rotational levels, the C_2S column density averaged over a 25" source is found equal to $1.5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. A similar column density ($\approx 1 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$) is derived for C_3S , assuming a source size of 25", $T_{rot} = 28 \text{ K}$ and $L = 2.0 \text{ D}$. The actual values of $N(C_2S)$ and $N(C_3S)$ depend on the source size and shape, as well as on the single rotation temperature assumption. There is an indication in Fig. 3, that the upper rotational levels of C_2S have a higher rotation temperature (40 K) than the lower levels (22 K). Considering this effect and the uncertainty on the source size, our column densities could well be a factor of 2 too small or too large. The column densities of C_2S and C_3S are a factor 20-80 smaller than that of CS (Table 3) and, surprisingly, similar to those of C_2H , C_3H and C_4H (e.g. Cernicharo et al. 1987). In comparison, the limits we can set on C_2O and C_3O (Table 3) are $\approx 10^5$ times smaller than the CO column density.

C_2S and C_3S can be formed at chemical equilibrium in the outer stellar atmosphere. They can also be formed further in the envelope from CS, by ion-molecule reactions. In the equilibrium chemistry, the abundance of sulfur molecules is a good probe of the Si/S elemental abundance ratio (see e.g. Tsuji 1973). At first glance, it could seem that this ratio is low, since the detection of C_2S and C_3S means that sulfur is not all locked in SiS or CS. However, the low abundance of H_2S and the large abundance of SiCC, which is 10-20 times larger than those of C_2S and C_3S (see Table 3), argue for Si \approx S, as in the sun.

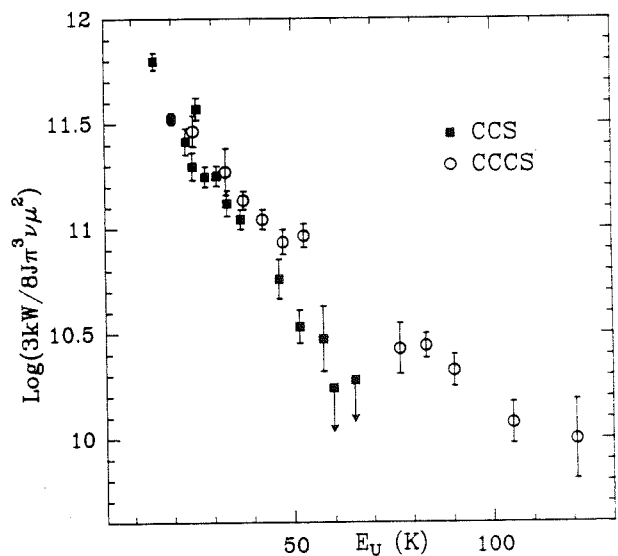


Figure 3: The rotation temperature diagrams of C_2S and C_3S in IRC+10216. The source is assumed to be a uniform brightness disk of diameter 25".

TABLE 3 : Molecular abundances in IRC+10216

Molecule	T_{rot}^* (K)	Column density † (cm^{-2})
SiS	80 ^d	$7 \cdot 10^{15}$
CS	15 ^a	$4 \cdot 10^{15}$
SiCC	20 ^c	$2 \cdot 10^{15}$
CCS	14 ^c	$1.5 \cdot 10^{14}$
CCCS	28 ^c	$1.1 \cdot 10^{14}$
H ₂ S	15 ^a	$1 \cdot 10^{13}$
SO	15 ^a	$\leq 2 \cdot 10^{13}$
OCS	15 ^a	$\leq 1.5 \cdot 10^{14}$
NS	15 ^a	$\leq 1.5 \cdot 10^{13}$
H ₂ CS	15 ^a	$\leq 1 \cdot 10^{13}$
CCO/CO	15 ^a	$\leq 5 \cdot 10^{-6}$
CCCO/CO	15 ^a	$\leq 10^{-5}$

† except for SiS, for a source diameter of 25" (see text)

* a: assumed; c: calculated; d: calculated T_{rot} would decrease to 40 K for a source diameter of 15"

Reactions with hydrocarbon ions, such as C_2H_2^+ , and with C^+ are thought to dominate the chemistry in the part of the IRC+10216 envelope where our observations are the most sensitive (3-30", or 10^{16} - 10^{17} cm from the star-- see e.g. Glassgold et al. 1987). In situ ion-molecule reactions could transform part of the CS formed near the star into C_2S , C_3S and even longer sulfur-bearing carbon chain molecules, in a way similar to the build up in dense clouds of long carbon chain molecules from C_2H_2 (e.g. Winnewisser and Herbst 1987). It is true that the abundances of C_2S and C_3S , with respect to CS, are an order of magnitude lower in IRC+10216 than in the cool dense cloud TMC1 (compare the values of Table 3 with those of Yamamoto et al. 1987); a similar difference between IRC+10216 and TMC1 is observed, however, for the $\text{HC}_3\text{N}/\text{HCN}$ and $\text{HC}_5\text{N}/\text{HC}_3\text{N}$ abundance ratios (see Fig. 4a,b of Cernicharo et al. 1987). This difference could be explained by a lower abundance of ions in IRC+10216 and/or by a decrease of reaction rates at the relatively high temperatures prevailing in this source (the kinetic temperature in the IRC+10216 envelope is 270 K, versus ≈ 10 K for TMC1--see e.g. Cernicharo et al. 1987, Cernicharo and Guélin 1987). A decrease by factors ≈ 4 in the reaction rates is predicted for ion-polar neutral reactions (such as the reactions of CS and HCN with ions) between 10 and 50 K (Adams et al. 1985). The observation of longer sulfur compounds would help to appraise the relative efficiencies of molecular formation in the stellar atmosphere and in the envelope.

The detection of C_2S , C_3S and H_2S makes it likely that some of the unidentified lines in IRC+10216 arise from sulfur molecules. We have reported previously the discovery of a $^2\Sigma$ radical, which according to its rotation constant ($B = 5967$ MHz) should be HSC_2 , HSiC_2 , HC_2Si or NCSi (Guélin et al. 1986). We have observed two more rotational transitions of this radical and derive an "effective" distortion constant $D_{\text{eff}} = 4.3 \pm 0.2$ kHz, much larger than the stretching constant D_0 expected for a linear carbon chain molecule of similar weight (e.g. $D_0(\text{C}_3\text{N}) = 0.9$ kHz). This means (as argued by Guélin et al. 1986) that the radical is a slightly asymmetric top, i.e. that it has a linear backbone and an off axis H atom, like H-SCC and H-SiCC (but contrary to NCSi or H-CCSi). The main point against HSC_2 was that few sulfur molecules were observed in IRC+10216. This argument does not apply any more and both HSC_2 and HSiC_2 now seem as likely.

In conclusion, after $\text{H}(\text{CC})_n\text{CN}$, C_nH , and C_nN , the first members of a new series of carbon chain molecules, C_nS ($n=1-3$), have been detected in the envelope of IRC+10216. The $\text{C}_2\text{S}/\text{CS}$ and $\text{C}_3\text{S}/\text{CS}$ abundance ratios are found to be $\approx 20-80$, and are similar to the $\text{HC}_3\text{N}/\text{HCN}$ ratio derived in that source. All three ratios are one order of magnitude larger in IRC+10216 than in the cold dark cloud TMC1. The detections of C_2S and C_3S , together with those of H_2S and of a $^2\Sigma$ radical which could be HSCC , raise to 5 or 6 the number of sulfur molecules identified in IRC+10216.

REFERENCES

- Adams, N.G., Smith, D., and Clary, D.C.: 1985, *Astrophys. J. Letters*, **296**, L31.
 Cernicharo, J., Kahane, C., Gomez-Gonzalez, J., and Guélin, M.: 1986, *Astron. Astrophys. Letters*, **167**, L5.
 Cernicharo, J., Guélin, M., Menten, K.M., and Walmsley, C.M.: 1987, *Astron. Astrophys.*, in press.
 Cernicharo, J., and Guélin, M.: 1987, *Astron. Astrophys.*, in press.
 Glassgold, A.E., Mamon, G.A., Omont, A., and Lucas, R.: 1987, preprint.
 Guilloteau, S., Lucas, R., and Omont, A.: 1987, private communication.
 Guélin, M., Cernicharo, J., Kahane, C., and Gomez-Gonzalez, J.: 1986, *Astron. Astrophys. Letters*, **157**, L17.
 Kahane, C., Cernicharo, J., Gomez-Gonzalez, J. and Guélin, M., 1987, submitted for publication.
 Lucas, R. et al.: 1987, in preparation.
 Murakami, A.: 1987, cited by Saito et al. (1987) and Yamamoto et al. (1987).
 Saito, S., Kawaguchi, K., Yamamoto, S., Ohishi, M., Suzuki, H., and Kaifu, N.: 1987, preprint.
 Thaddeus, P., Cummins, S.E., and Linke, R.A.: 1984, *Astrophys. J. Letters*, **283**, L45.
 Tsuji, T.: 1973, *Astron. Astrophys.*, **23**, 411.
 Winnewisser, G., and Herbst, E.: 1987, *Topics in Current Chemistry*, **139**, 119.
 Yamamoto, S., Saito, S., Kawaguchi, K., Kaifu, N., Suzuki, H., and Ohishi, M.: 1987, preprint.

DEUXIEME PARTIE

RAPPORTS ISOTOPIQUES

DANS LES ENVELOPPES CIRCUMSTELLAIRES

Les enveloppes circumstellaires constituent une sorte d'interface entre la matière stellaire et la matière interstellaire : le gaz qui les compose est éjecté de l'étoile par le mécanisme du vent stellaire et à quelques dixièmes de pc de l'étoile il se trouve dilué dans le milieu interstellaire ambiant. C'est à ce double titre que la mesure des rapports isotopiques dans les enveloppes circumstellaires est intéressant. D'une part, la composition isotopique du gaz circumstellaire est très directement liée aux mécanismes de nucléosynthèse qui se produisent au coeur de l'étoile (encore que compliquée par les processus de mélange de gaz, plus ou moins complets, du centre à la surface de l'étoile). Elle fournit donc des tests des modèles de nucléosynthèse et de mélange. D'autre part, la composition chimique et isotopique de la matière interstellaire se trouve perpétuellement modifiée par cet apport de matière "recyclée", qui constitue une fraction importante du gaz qui retourne au milieu interstellaire (Zuckerman *et al*, 1978; Knapp et Morris, 1985; Thronson *et al*, 1987; Claussen *et al*, 1987; Jura et Kleinman, 1989) et dont la connaissance permet de mieux comprendre l'histoire de l'évolution chimique de notre Galaxie par exemple et d'interpréter les gradients de composition isotopique que l'on observe (voir par exemple Penzias, 1980).

Le prochain chapitre est consacré à la présentation des caractéristiques les plus marquantes des enveloppes circumstellaires; on y trouvera également quelques rappels sur l'évolution stellaire, la nucléosynthèse et sur les rapports d'abondances isotopiques.

Le chapitre suivant sera consacré à la mesure de rapports isotopiques. Tout d'abord ceux du carbone, de l'azote, du soufre et du silicium, dans l'enveloppe de l'étoile carbonée IRC+10216. Ensuite, nous nous intéresserons à la mesure du rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans l'enveloppe de quatre étoiles carbonées de type J, c'est-à-dire anormalement riches en ^{13}C . Nous terminerons ce chapitre par l'étude du rapport isotopique $^{17}\text{O}/^{18}\text{O}$, des problèmes qu'il soulève et sa mesure dans quelques enveloppes circumstellaires "de référence".

Chapitre 3

Quelques généralités sur les enveloppes circumstellaires

Le phénomène de perte de masse existe à tous les stades de la vie d'une étoile, avec des efficacités très variables. Lors des premiers stades de la vie d'une étoile, avant même qu'elle ait atteint la séquence principale, des vents stellaires très violents peuvent se développer, dont une manifestation spectaculaire, récemment découverte grâce au gain en sensibilité et en résolution spatiale des radiotélescopes, est l'existence de flots de gaz moléculaire, souvent bipolaires, dans le nuage qui a donné naissance à l'étoile. Plus tard au cours de leur existence, les étoiles très massives ($M > 25 M_{\odot}$) peuvent perdre jusqu'à la moitié de leur masse alors qu'elles sont encore sur la Séquence Principale et finissent leur existence comme supernovae. Nous nous intéresserons ici à des étoiles de masses intermédiaires ($1 M_{\odot} < M < 9 M_{\odot}$) qui ne développent de forts vents stellaires qu'après avoir épuisé leur cœur d'hydrogène puis d'hélium. Elles se trouvent alors dans la phase Géante Rouge. Au cours de leur évolution le long de la Branche Asymptotique des Géantes (AGB en anglais), leur taux de perte de masse augmente et elles éjectent des enveloppes circumstellaires étendues, de plus en plus froides et opaques, qui font l'objet de notre étude et dont nous détaillons ci-dessous un certain nombre de caractéristiques, après avoir présenté la population des géantes rouges et fait quelques rappels sur la nucléosynthèse.

I. LES GEANTES ROUGES

Sous cette appellation se cache une grande variété d'objets, puisque toutes les étoiles, à l'exclusion des plus massives, deviennent des géantes rouges après avoir quitté la Séquence Principale (SP), c'est-à-dire lorsqu'elles ont achevé de brûler leur cœur d'hydrogène. Nous n'avons nullement l'ambition de présenter ici un panorama de leurs propriétés; nous renvoyons le lecteur par exemple à la monographie sur le sujet éditée par la NASA et le CNRS (Johnson et Querci, 1986), ainsi qu'aux très nombreuses références citées dans cet ouvrage.

Les deux principaux traits communs aux géantes rouges sont, comme leur nom l'indique, leur taille (le rayon de l'étoile peut atteindre jusqu'à plusieurs centaines de fois la

valeur qu'il avait lorsque l'étoile était sur la SP) et leur couleur, c'est-à-dire leur température (les températures effectives des photosphères sont typiquement comprises entre 5000 K et moins de 2000 K, ce qui situe les Géantes Rouges parmi les étoiles les plus froides connues). Il faut ajouter à ces deux caractéristiques que la plupart des Géantes Rouges sont, au moins lors de la phase AGB, des étoiles variables.

A. Quelques rappels sur l'évolution stellaire

Il existe des modèles très élaborés des dernières étapes de l'évolution stellaire (voir par exemple les articles de revue de Iben et Renzini, 1983; Iben, 1986; Weidemann, 1987; Schonberger, 1987; Kwok, 1987). Nous nous contentons ici de rappeler très brièvement les caractéristiques les plus marquantes de cette évolution.

Après leur passage sur la SP, c'est-à-dire après la combustion du cœur d'hydrogène, les étoiles de masses intermédiaires développent un cœur compact d'hélium. C'est à ce stade que le rayon de l'étoile augmente considérablement. Cette évolution se traduit dans le diagramme Hertzsprung-Russel (HR) (voir la **Figure III.1**) par un rapide déplacement vers la droite, à luminosité à peu près constante, vers les basses températures, suivi d'un mouvement vers le haut, qui traduit une brusque augmentation de la luminosité, à température pratiquement constante, le long de la branche des Géantes Rouges. Pour la première fois de l'histoire de l'étoile, une fraction des produits de nucléosynthèse formés au centre de l'étoile atteint la surface grâce à des mécanismes de mélange des diverses couches de l'étoile. La combustion du cœur d'hélium est violente pour les étoiles de plus faible masse (c'est le "flash de l'hélium"), tranquille pour les autres. Après la combustion du cœur d'hélium se forme un cœur compact, dégénéré, de carbone et d'oxygène, très semblable à une naine blanche. Cette phase s'accompagne d'une seconde "éruption" à la surface de l'étoile de matière "processée" et l'hélium continue à brûler en couche. Le point figuratif de l'étoile se déplace de nouveau dans le diagramme HR vers les températures plus basses puis brutalement la luminosité augmente. C'est la phase d'Asymptote de la Branche Géante (AGB en anglais). Elle correspond à une double combustion en couche : l'hélium à l'intérieur et l'hydrogène à l'extérieur. La phase AGB est caractérisée par l'existence de "pulsations thermiques" : le rayon de l'étoile subit d'importantes variations et ce sont alternativement la combustion de l'hélium et celle de l'hydrogène qui dominent la luminosité de l'étoile. Ces pulsations s'accompagnent de mouvements convectifs intermittents qui amènent à la surface de l'étoile les produits de nucléosynthèse, en

particulier des éléments lourds produits par les processus de type s (c'est le troisième processus de mélange). Lors de la phase AGB, toutes les étoiles présentent d'importantes pertes de masse ($\sim 10^{-8}$ à $10^{-4} M_{\odot}$ par an, voir par exemple Knapp et Morris, 1985 ou Claussen *et al*, 1987) et se trouvent donc environnées d'une enveloppe circumstellaire plus ou moins opaque. Après une phase dite de "pre-nébuleuse planétaire", qui suit le régime de "super vent", l'étoile devient, normalement, une nébuleuse planétaire (voir par exemple Zuckerman *et al* 1977, 1978, Kwok, 1987) : l'enveloppe, dont l'expansion se poursuit, est ionisée par les photons émis par l'étoile dont la température a considérablement augmenté. Après l'éjection finale de la nébuleuse gazeuse, il ne reste plus qu'un cœur compact dégénéré, l'étoile est devenue une naine blanche (Zuckerman, 1980; Olofsson, 1985).

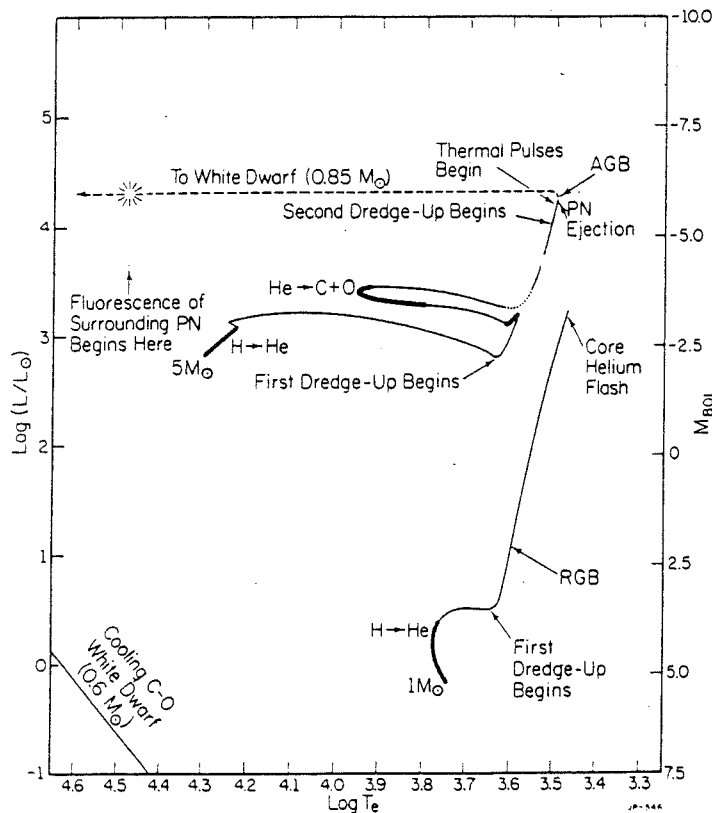


Figure III.1 : Trajets évolutifs de deux étoiles de masse intermédiaire ($1 M_{\odot}$ et $5 M_{\odot}$) dans le diagramme H.R., depuis la Séquence Principale jusqu'au stade de Nébuleuse Planétaire (d'après Iben, 1985).

B. Les trois principaux types de Géantes Rouges

Il est a priori possible d'utiliser de nombreux critères de classification, tant est grande la variété des géantes rouges: le spectre, la composition chimique, les rapports d'abondance, la photométrie, la couleur, le type de variabilité (voir par exemple, Querci, 1986); les trois premiers critères sont fortement liés, et c'est la classification spectrale, la première à avoir été établie, qui est très largement utilisée. Nous ne distinguerons ici que trois types de géantes rouges, qui se différencient fondamentalement par leur rapport d'abondance C/O :

* **les étoiles M**, également appelées étoiles oxygénées, ont un rapport d'abondance $C/O < 1$. Leur spectre visible présente des bandes d'absorption de molécules oxygénées comme TiO, VO, OH, ou H₂O, formées dans les couches internes de l'enveloppe circumstellaire; de nombreuses molécules oxygénées se forment, ou subsistent, dans l'enveloppe (quand elle existe), à plus grande distance de l'étoile centrale (CO qui contient la quasi totalité du carbone disponible, OH, SiO, H₂O); plusieurs espèces soufrées (H₂S, SO, SO₂) ont été également détectées récemment (Guilloteau *et al*, 1986; Morris *et al*, 1987), ainsi que des espèces azotées (NH₃, HCN) (Nercessian *et al*, 1988); ces molécules circumstellaires se manifestent par des raies IR et radio (en particulier des raies masers pour OH, SiO et H₂O). Le spectre IR présente en outre une émission (ou, plus rarement, une absorption) à 10μm, caractéristique des grains de silicate mêlés au gaz moléculaire de l'enveloppe. Environ la moitié des étoiles oxygénées sont des variables très régulières (de type Mira). Parmi les étoiles M, les étoiles dites OH/IR, présentent une émission maser de OH, principalement à 1612 MHz, et une émission IR intenses. Les recherches d'émission maser OH (Engels, 1979; Herman et Habing, 1985), encore étendues grâce à l'étude systématique des sources infrarouges IRAS (voir par exemple van der Veen et Habing, 1988; te Lintel Hekkert *et al*, 1988; Sivagnanam, 1988) ont permis de détecter jusqu'à présent plus de 1400 enveloppes circumstellaires oxygénées.

* **les étoiles C**, ou étoiles carbonées, présentent un rapport d'abondance inverse ($C/O > 1$). De nombreuses molécules (C₂, C₃, SiC₂, CN, CH,...) se manifestent sous forme de bandes d'absorption dans le spectre visible. La chimie des enveloppes carbonées, révélée en particulier par les observations radio (voir en Annexe A, la liste des raies moléculaires détectées à 2 et 3mm dans IRC+10216, prototype des étoiles carbonées) et aussi par les développements récents de la spectroscopie IR, apparaît extrêmement riche. La poussière de ces enveloppes est probablement largement composée de graphite et de grains de SiC, qui se manifestent, dans les enveloppes pas trop massives, par une émission à 11.4 μm. On

distingue plusieurs sous-classes parmi les étoiles carbonées, nous ne citerons que les étoiles de type J, riches en ^{13}C . La proportion de variables irrégulières ou semi-régulières est d'environ 80 % parmi les étoiles C. Plus de 3000 étoiles carbonées ont été détectées en visible et en IR proche (Stephenson, 1973), dont plus d'un millier figure dans le catalogue de sources ponctuelles (PSC) et environ 500 dans le catalogue de spectres à faible résolution (LRS), établis à partir des observations infrarouges du satellite IRAS (Chan et Kwok, 1988). Environ 200 enveloppes carbonées ont été détectées en émission radio de CO, molécule la plus abondante de l'enveloppe après H_2 . Le stade d'évolution des étoiles carbonées n'est pas parfaitement établi, mais des modèles suggèrent que les étoiles oxygénées peuvent devenir des étoiles carbonées par apport de matière riche en carbone à la surface de l'étoile, lors de la phase des pulses thermiques de la branche AGB (voir par exemple Iben et Renzini, 1983; Claussen *et al*, 1987; Willems et de Jong, 1988; Chan et Kwok, 1988). La transition d'un type d'étoile à l'autre se ferait en 10^4 à 10^5 ans selon les auteurs (Iben et Renzini, 1983; Willems et de Jong, 1988; Chan et Kwok, 1988).

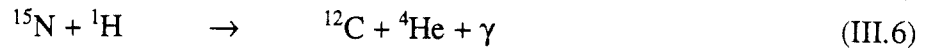
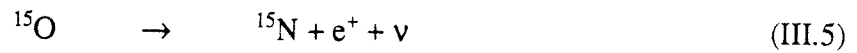
*** les étoiles S** présentent des caractéristiques intermédiaires entre celles des étoiles M et des étoiles C, en particulier, leur rapport d'abondances C/O est de l'ordre de 1 ou très légèrement inférieur (Jura, 1988). Elles pourraient constituer un stade d'évolution intermédiaire entre ceux des étoiles oxygénées et carbonées (cette interprétation est contestée par Willems et de Jong, 1988, qui considèrent que les étoiles S correspondent à une évolution alternative à celle des étoiles C).

C. Nucléosynthèse et mélange des produits "processés"

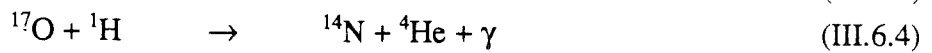
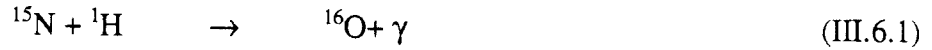
Lors de la première phase de mélange, qui survient lorsque l'étoile a quitté la SP pour se transformer en Géante Rouge, ce sont les produits de synthèse de la combustion de l'hydrogène qui se trouvent poussés à la surface de l'étoile.

Pour les étoiles de masse intermédiaire, la combustion de l'hydrogène se fait selon le cycle CNO :

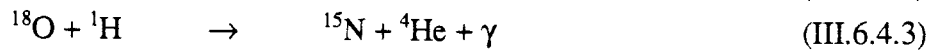




La réaction (III.6) peut alternativement être remplacée par la séquence:



et la réaction (III.6.4) elle même est en compétition avec :



Le cycle CNO a pour effet un enrichissement de la matière "processée" en ^{14}N en raison du taux relativement faible de la réaction (III.4) et une augmentation du rapport $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ via la destruction de ^{12}C par (III.1) et la production de ^{13}C par (III.2). Il résulte également en une diminution des abondances de ^{15}N et de ^{18}O et une augmentation de l'abondance de ^{17}O .

Les principales modifications des abondances élémentaires et isotopiques à la surface de l'étoile, que l'apport des produits du cycle CNO entraîne, sont les suivantes (voir par exemple Iben et Renzini, 1983) :

- un doublement de l'abondance de ^{14}N
- une réduction de l'abondance de ^{12}C d'environ 30% et une diminution du rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$, par exemple de la valeur solaire 90 à une valeur de l'ordre de 20 à 30
- pratiquement aucune modification de l'abondance de ^{16}O ;
- une diminution de plusieurs ordres de grandeurs des abondances de Li et Be
- pour les isotopes rares de l'oxygène, les prédictions des modèles sont beaucoup plus incertaines, en particulier parce que les taux des réactions (III.6.4), (III.6.4.1), (III.6.4.3) sont

très mal connus (Harris *et al*, 1983). Selon Harris et Lambert (1984), les principaux effets du mélange des produits du cycle CNO sont les suivants : pas de diminution du rapport $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$ pour les étoiles de faible masse ($\sim 1 M_{\odot}$ ou moins) mais une réduction importante de ce rapport pour les étoiles de masse $> 1 M_{\odot}$ (typiquement de la valeur terrestre (~ 2600) à une valeur de 250 à 600 selon les modèles); une augmentation plus modeste du rapport $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ (par exemple de la valeur terrestre 490 jusqu'à des valeurs ~ 600 à 1000 selon la masse de l'étoile).

Lors de la deuxième phase de mélange, qui suit la fin de la combustion du cœur d'hélium et accompagne la formation du cœur dégénéré de carbone et d'oxygène pour les étoiles de masse $> 3 M_{\odot}$, la surface de l'étoile s'enrichit encore en ^{14}N , au détriment de ^{12}C et de ^{16}O .

Lors des pulsations thermiques de la phase AGB, la combustion de l'hélium, qui est dominée par la réaction triple alpha



produit essentiellement du ^{12}C , qui se transforme ensuite partiellement en ^{16}O



Pendant la phase "inter-pulsation", qui correspond à la combustion de l'hydrogène, ^{12}C et ^{16}O sont convertis en ^{14}N .

Les mouvements convectifs qui accompagnent les pulsations ont pour effet d'emporter une matière riche en ^{12}C vers la surface de l'étoile, qui, initialement oxygénée, peut ainsi devenir une étoile carbonée. Cet apport de ^{12}C à la surface de l'enveloppe a également pour effet d'augmenter le rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$. (Cependant, pour les étoiles massives, la température à la base de l'enveloppe est encore suffisamment élevée, pendant les phases de combustion de H, pour que ^{12}C soit converti en ^{13}C puis en ^{14}N , via le processus dit "de combustion de l'enveloppe". Ce processus a pour effet de retarder, et même pour les étoiles AGB les plus massives, d'empêcher la transformation de l'étoile M en étoile C. Il a aussi pour conséquence d'enrichir la surface de l'étoile en ^{14}N et en ^{13}C , si bien que le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ tend vers sa valeur d'équilibre, ~ 3.5 , donnée par le rapport des taux des

réactions (III.1) et (III.3)); ce mécanisme a été évoqué pour expliquer la très forte surabondance en ^{13}C présentée par les étoiles carbonées de type J (Iben et Renzini, 1983).

Les abondances finales prédites par ce scénario, qui donne une explication très séduisante de l'existence de géantes rouges de types M, S et C, dépendent fortement de l'efficacité du troisième processus de mélange, et également de la section efficace de la réaction (III.9), qui demeurent très incertains (voir par exemple Woosley, 1986).

II. LES ENVELOPPES CIRCUMSTELLAIRES AUTOUR DES GEANTES ROUGES

A. Le phénomène de perte de masse

Le phénomène de perte de masse des étoiles géantes rouges de masse intermédiaire joue un rôle crucial dans l'évolution stellaire, puisque sans lui, toutes les étoiles de masse supérieure à $1.4 M_{\odot}$ deviendraient des supernovae. En outre, ce taux de perte de masse est suffisamment important pour contribuer de façon significative à l'enrichissement du milieu interstellaire (Knapp et Morris, 1985; Jura et Kleinman, 1989). Nous décrivons rapidement ci-dessous quelques méthodes, parmi les plus employées, pour déterminer le taux de perte de masse (voir aussi Bowers *et al*, 1983; ou l'article de revue de Goldberg, 1986); les processus de formation du vent stellaire, le plus souvent évoqués pour les étoiles évoluées, sont ensuite brièvement exposés (ce sujet a été longuement traité par Holzer et MacGregor, 1985; voir aussi Morris, 1987; Jura, 1986, 1988).

1. Détermination des taux de perte de masse et des vitesses d'expansion

Si l'on suppose que la perte de masse est stationnaire, à symétrie sphérique, et que la vitesse d'expansion est constante le long de la ligne de visée, le taux de perte de masse peut se mettre sous la forme :

$$dM/dt = 4\pi N \mu m_H R_o V \quad (\text{III.10})$$

où μ est le poids moléculaire moyen, m_H , la masse d'un atome d'hydrogène, R_o , le rayon interne de l'enveloppe, V , la vitesse d'expansion et N la densité projetée d'hydrogène le long de la ligne de visée. Diverses observations peuvent être utilisées pour déterminer ces paramètres.

a. Observations optiques et UV

Lorsque l'épaisseur optique de la poussière, mêlée au gaz moléculaire de l'enveloppe, n'est pas trop grande (cas de certaines enveloppes M et S), le vent stellaire se manifeste dans le domaine optique et UV proche par des raies atomiques qui présentent des profils complexes, dits P Cygni, dont la composante en absorption est déplacée, par rapport à la composante en émission, de la vitesse d'expansion de l'enveloppe. Les profils P Cygni fournissent également une mesure de la densité projetée d'atomes dans le niveau inférieur de la transition considérée, dont il est possible de déduire, moyennant un modèle de transfert et d'excitation du gaz, et une hypothèse sur l'abondance des atomes, une estimation de la densité projetée d'hydrogène, N . Cette détermination, et plus encore, celle du rayon interne de l'enveloppe, R_o , font peser sur la valeur du taux de perte de masse, dM/dt , ainsi déterminé, des incertitudes qui peuvent aller jusqu'à plusieurs ordres de grandeur (Querci, 1986).

b. Observations infrarouges

En raison de l'émission de la poussière qu'elles contiennent, les enveloppes circumstellaires sont avant tout des sources infrarouges. Les catalogues de sources infrarouges successifs, d'abord le catalogue Two Micron Sky Survey (TMSS) (Neugebauer et Leighton, 1969), puis le catalogue AFGL (Price et Walker, 1976; Price et Murdock, 1983), et surtout, depuis 1983, les catalogues IRAS de sources ponctuelles (PSC) et de spectres à faible résolution (LSR), ont permis la détection d'un nombre considérable d'enveloppes circumstellaires (selon Omont, 1989, de l'ordre de 80 000 dans le catalogue PSC et plus de 4000 dans le catalogue LSR). Ces données infrarouges fournissent une méthode, très employée, de détermination de la perte de masse des étoiles.

Le catalogue TMSS et les données IRAS ont été utilisées par Claussen *et al* (1987), Jura (1988), Jura et Kleinman (1989), Kleinman *et al* (1989) pour déterminer respectivement

les taux de perte de masse des étoiles carbonées, de type S, d'enveloppes très opaques et d'enveloppes oxygénées.

Pour les trois types d'étoiles (M, S et C), Jura (1986, 1987) a montré, qu'avec un rapport poussière/gaz constant de $4.5 \cdot 10^{-3}$ (dédit d'une comparaison avec les taux de perte de masse de gaz calculés par Knapp, 1985), et une émissivité des grains de $150 \text{ cm}^2 \text{ g}^{-1}$ à $60 \mu\text{m}$, la perte de masse de gaz moyenne au cours du temps peut être évaluée par :

$$dM/dt = 1.7 \cdot 10^{-7} (V/15) D^2 F_{\nu}(60) (\lambda/10)^{1/2} (10^4/L)^{1/2} M_{\odot} / \text{an} \quad (\text{III.11})$$

où V est la vitesse d'expansion, exprimée en km/s (dédit d'observations moléculaires), D la distance de l'enveloppe (en kpc), $F_{\nu}(60)$ le flux à $60 \mu\text{m}$ (en Jy), λ la longueur d'onde moyenne du rayonnement issu de l'étoile et de l'enveloppe circumstellaire (en μm) et L la luminosité totale de l'étoile (en L_{\odot}). Claussen *et al* (1987), Jura (1988), Jura et Kleinman (1989) et Kleinman *et al* (1989) adoptent pour λ une valeur de $10 \mu\text{m}$ si $F_{\nu}(12 \mu\text{m}) > F_{\nu}(2 \mu\text{m})$, une valeur de $2.2 \mu\text{m}$ sinon. Lorsque la valeur de L est inconnue, elle est supposée égale à $10^4 L_{\odot}$.

Les observations submillimétriques ($\lambda > 300 \mu\text{m}$) ont également été utilisées, de façon moins extensive, pour déterminer le taux de perte de poussière (voir par exemple Sopka *et al*, 1985). Van der Veen et Habing (1988) établissent une relation permettant de calculer le taux de perte de masse à partir du rapports des flux IR à 12 et à $25 \mu\text{m}$. Une méthode très élaborée, qui utilise l'émission (ou l'absorption) des silicates à $10 \mu\text{m}$ et la température de couleur en infrarouge proche, a été employée par Schutte et Tielens (1989) pour déterminer les pertes de masse des étoiles oxygénées.

c. Masers OH, H_2O et SiO

De très nombreuses étoiles oxygénées (en particulier les étoiles dites OH/IR) sont caractérisées par des émissions masers de OH, H_2O et SiO. La transition maser la plus utilisée pour déterminer le taux de perte de masse et la vitesse d'expansion de l'enveloppe est la transition de OH à 1612 MHz. Son spectre se présente sous forme de deux pics, dont la séparation mesure la vitesse d'expansion de l'enveloppe (voir par exemple Nguyen-Q-Rieu, 1986). Une comparaison empirique entre le rayon de la région d'émission maser (déterminé soit par une mesure directe, soit par la mesure du retard de phase entre les deux pics OH) et

la perte de masse déterminée par des observations radio ou IR a montré (voir par exemple Bowers, 1985) qu'il existait entre les deux grandeurs une loi de puissance, ce qui fournit une méthode supplémentaire de détermination du taux de perte de masse (au moins en ordre de grandeur). Baud et Habing (1983) ont proposé une relation semi-empirique permettant de calculer la perte de masse à partir du flux maser de OH :

$$dM/dt (M_{\odot} / \text{an}) = 2.65 \cdot 10^{-5} (V / 15) D (F_{\text{OH}} / 100)^{1/2} \quad (\text{III.12})$$

où V est la vitesse d'expansion (en km/s), D la distance (en kpc) et F_{OH} le flux en Jy.

La luminosité des masers OH, ainsi que la luminosité des masers H_2O au maximum de la courbe de lumière, sont également des fonctions de la perte de masse (Bowers et Hagen, 1984). Le rapport des deux luminosités fournit donc une estimation de la perte de masse qui présente le grand intérêt d'être indépendante de la distance de l'enveloppe.

d. Raies moléculaires rotationnelles

L'amélioration considérable des performances des récepteurs millimétriques des grands radiotélescopes (BTL, NRAO, Onsala) et la mise en service d'un nouvel instrument, encore plus sensible, le télescope de 30m de l'IRAM, a permis, en moins de dix ans, une extension considérable de l'observation de l'émission moléculaire millimétrique des enveloppes circumstellaires. Les raies de rotation ($J=1-0$) et ($J=2-1$) de CO et de ^{13}CO , d'abord détectées dans les enveloppes des étoiles de forte perte de masse et/ou proches (voir par exemple Zuckerman *et al*, 1977), sont maintenant observées dans des centaines d'enveloppes autant carbonées, qu'oxygénées (souvent identifiées grâce aux observations infrarouges IRAS), et fournissent la méthode, probablement la plus employée et peut-être la plus précise, de détermination des taux de perte de masse et des vitesses d'expansion (Knapp et Morris, 1985; Zuckerman et Dyck, 1986a, 1986b; Zuckerman *et al*, 1986; Olofsson *et al* 1987, 1988; Nguyen-Q-Rieu *et al* 1987; Knapp *et al* 1989, Likkell *et al*, 1987, 1988, Loup *et al*, 1989; Heske *et al*, 1989).

En comparant les profils des raies $^{12}\text{CO}(1-0)$ observées avec l'antenne de 7m des BTL et ceux calculés en utilisant des modèles d'enveloppe (voir ci-après), Knapp et Morris (1985) ont établi les expressions suivantes, qui permettent de déterminer les taux de perte de masse à partir des intensités des raies observées :

pour une raie $^{12}\text{CO}(1-0)$ optiquement épaisse, l'excitation de la transition est dominée par les collisions et la capture radiative des photons millimétriques, et

$$dM/dt (M_{\odot} / \text{an}) = 5 \cdot 10^{-14} [T_B V_o^2 D^2 f^{-0.85}] \quad (\text{III.14})$$

où T_B (en K) est la température de brillance au centre de la raie, V_o (en km/s) la vitesse terminale d'expansion de l'enveloppe (déduite de la largeur de la raie, voir ci-dessous), D la distance de l'enveloppe (en pc) et f le rapport d'abondances $[\text{CO}]/[\text{H}_2]$ (de $3 \cdot 10^{-4}$ à $8 \cdot 10^{-4}$ selon les types d'enveloppes).

pour une raie $^{12}\text{CO}(1-0)$ optiquement mince, l'excitation de la transition est dominée par le pompage IR, à $4.6 \mu\text{m}$, de la transition de vibro-rotation ($v = 0 \rightarrow 1$), et

$$dM/dt = 10^{-16} [T_B V_o^2 D^2 f^{-1}] [\log(W / 0.04)] (r_m / 4.10^{17})^{-0.4} \quad (\text{III.15})$$

où W est le rapport du flux de l'étoile centrale à $4.6 \mu\text{m}$ à celui d'un corps noir d'une température de 2000 K et d'un rayon de $5 \cdot 10^{13}$ cm, et r_m est le rayon maximum de l'enveloppe CO (limitée par la photodissociation).

Dans l'un et l'autre cas, le facteur numérique, (qui inclut les termes en W et r_m dans le 2ème cas), est probablement connu à 50 % près et ce sont les incertitudes sur la distance des enveloppes qui dominent les incertitudes sur l'estimation de la perte de masse (au moins si l'on exclut le cas des enveloppes massives OH/IR, sur lequel nous revenons un peu plus loin).

Les valeurs de perte de masse ainsi déterminées vont de quelques $10^{-8} M_{\odot} / \text{an}$ à environ $10^{-4} M_{\odot} / \text{an}$:

Les 210 étoiles carbonées répertoriées dans le catalogue TMSS et étudiées par Claussen *et al* (1987) ont des pertes de masse comprises entre $3.2 \cdot 10^{-8}$ et $4.3 \cdot 10^{-5} M_{\odot} / \text{an}$, centrées autour d'une valeur moyenne de $2.0 \cdot 10^{-7} M_{\odot} / \text{an}$. En excluant les nébuleuses planétaires et les prénébuleuses planétaires, ainsi qu'une étoile oxygénée à très forte perte de masse (AFGL5379), les 27 étoiles carbonées et 27 étoiles oxygénées de forte perte de masse, et distantes d'au plus 1kpc, inventoriées par Jura et Kleinman (1989) montrent des taux de perte de masse moyens tout à fait comparables pour les étoiles oxygénées ($1.07 \cdot 10^{-5} M_{\odot} / \text{an}$) et pour les étoiles carbonées ($0.94 \cdot 10^{-5} M_{\odot} / \text{an}$). Il en est de même des 22 étoiles oxygénées

et des 25 étoiles carbonées observées par Knapp et Morris (1985), qui présentent respectivement des taux de perte de masse moyens de $2.2 \cdot 10^{-5}$ et de $2.1 \cdot 10^{-5} M_{\odot} / \text{an}$. (On peut remarquer que les taux de perte de masse déduits des observations CO sont en moyenne un facteur 2 plus élevés que ceux déduits des flux IR. D'après Jura et Kleinman, 1989, qui signalent le même facteur entre leurs estimations de pertes de masses et celles de Olofsson *et al* (1987 et 1988), plusieurs explications peuvent être avancées: d'une part, les incertitudes sur les paramètres utilisés par les modèles, calibrations absolues des données CO et IR, rapport gaz/poussière, émissivité infrarouge des grains, d'autre part, les approximations des modèles eux-mêmes, comme l'hypothèse de symétrie sphérique, par exemple).

Les 65 étoiles S répertoriées par Jura (1988), présentent une perte de masse moyenne de $6 \cdot 10^{-8} M_{\odot} / \text{an}$, qui est peut être sous-estimée en raison (i) d'un rapport gaz / poussière trop faible et (ii) d'un effet de sélection possible qui exclurait de la classification S, (établie à partir du spectre optique), les étoiles S de plus forte perte de masse, et donc plus obscurcies par la poussière.

Signalons que les nébuleuses planétaires comme NGC7027, ou certaines pré-nébuleuses planétaires, comme CRL2688, présentent des taux de perte de masse probablement très élevés (de l'ordre de $10^{-4} M_{\odot} / \text{an}$).

Le bon accord entre les taux de perte de masse déterminés à partir des observations radio et infrarouge, (généralement un facteur 2, voir ci-dessus ainsi que Jura et Kleinman, 1989), est gravement mis en défaut dans un cas : celui des enveloppes oxygénées OH/IR pour lesquelles les observations CO fournissent des pertes de masse de 10 à 100 fois plus faibles que les valeurs déduites des observations IR. Cette déficience en émission CO (qui rend d'ailleurs l'observation radio de ces étoiles difficile) est interprétée par Heske *et al* (1989) comme la manifestation d'une température cinétique particulièrement faible dans l'enveloppe.

En ce qui concerne les vitesses d'expansion, Zuckerman *et al*, (1986), à partir de la compilation des observations CO de 60 étoiles carbonées, de 6 étoiles S et de 46 étoiles oxygénées, ont conclu que leurs vitesses d'expansion moyennes sont respectivement de $(17.1 \pm 5.8) \text{ km/s}$, $(11.7 \pm 4.9) \text{ km/s}$ et $(14.6 \pm 8.4) \text{ km/s}$. En outre, il apparaît que les étoiles carbonées ou oxygénées, (en particulier les supergéantes), qui présentent des vitesses

d'expansion supérieures à 25 km/s sont toutes situées à de faibles latitudes galactiques ($|b| \leq 12^\circ$) (Zuckerman et Dyck, 1989).

Signalons que certaines enveloppes comme OH231.8+4.2 (Lucas *et al*, 1987), CRL618 (Bachiller *et al* 1988, Bujarrabal *et al*, 1989) ou V Hya (Kahane *et al*, 1988b et Annexe B) présentent des pertes de masse non sphériques, de vitesses beaucoup plus élevées.

2. Mécanismes d'accélération des vents

La plupart des étoiles lumineuses, quelque soit leur stade d'évolution, subissent des pertes de masse importantes. Cependant les mécanismes mis en jeu dans le cas des étoiles chaudes et jeunes, comme les étoiles O et B, sont très différents de ceux qui intéressent les étoiles froides évoluées, que sont les géantes rouges. Nous passons brièvement en revue ci-dessous les quatre principaux mécanismes évoqués pour expliquer les vents des étoiles évoluées (voir aussi Holzer et MacGregor, 1985; Morris, 1987). La principale difficulté à laquelle se heurtent les modèles d'accélération des vents est de rendre compte simultanément du taux de perte de masse, (contrôlé par l'apport d'énergie dans la région subsonique du flot), et de la vitesse terminale d'expansion, (contrôlée, elle, par un apport d'énergie dans la région supersonique).

a. Pression thermique

Pour rendre compte des pertes de masse observées, ce mécanisme nécessiterait des températures telles, que le rayonnement thermique (UV et EUV) qui en résulterait serait bien supérieur à ce que l'on observe (Holzer et MacGregor, 1985).

b. Pression de radiation

L' accélération du gaz de l'enveloppe par la pression de radiation sur les grains de poussière a fait l'objet de nombreuses études (Gilman, 1972; Kwok, 1975; Lucy, 1976; Menietti et Fix, 1978; Woodrow et Auman, 1982; Tielens, 1983) (la pression de radiation sur les molécules est un effet beaucoup plus faible; voir par exemple Maciel 1976, 1977).

L'importance de ce mécanisme d'accélération du vent est attestée par plusieurs faits observationnels : (i) l'excès d'émission infrarouge des géantes rouges est la preuve de l'existence de poussière abondante dans l'enveloppe; (ii) ce mécanisme conduit à une vitesse d'expansion terminale qui dépend de la luminosité de l'étoile centrale en $L^{1/4}$ (Gehrz et Woolf, 1971; Jura, 1984), résultat cohérent avec les observations (Jura 1984); (iii) pour la plupart des étoiles, le flux radial de quantité de mouvement du vent, $(dM/dt).V$, est inférieur ou égal au flux radial de quantité de mouvement du champ de rayonnement, L/c (Zuckerman et Dyck, 1986a,b; Jura, 1986).

Les modèles détaillés (voir par exemple Rowan-Robinson et Harris, 1982, 1983a,b) nécessitent la connaissance de la température de l'étoile centrale, des propriétés de la poussière (température de condensation, densité, extinction,...) et des dimensions de l'enveloppe. Certains de ces paramètres, en particulier l'épaisseur optique de la poussière, sont sujets à d'importantes variations, selon les auteurs, si bien que les prédictions des modèles d'accélération du vent par la pression de radiation présentent une assez grande dispersion.

Il semble cependant clair que ce mécanisme, seul, ne suffit pas à rendre compte de pertes de masse de l'ordre de 10^{-6} à $10^{-4} M_{\odot}$ / an (Willson et Bowen, 1986) : la difficulté principale est l'impossibilité d'obtenir une densité de matière suffisante, à la distance de l'étoile où la poussière se condense (voir ci-après).

c. Ondes de choc

La plupart des géantes rouges sont des étoiles variables et les corrélations entre perte de masse et pulsations semblent bien établies : les étoiles présentant de fortes pertes de masses ont des périodes supérieures à quelques 300 jours (Jura 1986, 1988; Degioia-Eastwood *et al*, 1981).

La génération d'ondes de choc par les pulsations des étoiles variables type Mira a été étudiée dans deux cas extrêmes : le choc isotherme, qui conduit à des taux de perte de masse trop faibles (Drinkwater et Wood, 1985; Bertschinger et Chevalier, 1985; Willson et Bowen, 1986), et le choc adiabatique, qui conduit, lui, à des taux de perte de masse et des vitesses terminales trop élevés (Wilson et Hill, 1979; Wood, 1979). En revanche, l'association des deux types de chocs (Wilson et Hill, 1979) et surtout des ondes de choc et de la pression de

radiation (Wood, 1979; Jones *et al*, 1981), semble pouvoir rendre compte de façon satisfaisante des paramètres de perte de masse observés.

d. Ondes d' Alfvén

Ce mécanisme conduit à des taux de pertes de masse satisfaisants, mais ceux-ci s'accompagnent de vitesses terminales d'expansion beaucoup trop grandes (Hartmann et MacGregor, 1980). Son association avec l'accélération par pression de radiation (Hartmann et Averett, 1984) semble en revanche plus prometteuse.

En conclusion, le scénario qui semble maintenant recueillir une approbation générale (Jones *et al*, 1981; Woodrow et Auman, 1982; Jura, 1984, 1986; Willson et Bowen, 1986) est celui d'un mécanisme d'accélération en deux temps : l'accélération par les chocs liés aux pulsations, (peut-être aussi par les ondes d'Alfvén), assure la lévitation du gaz jusqu'au point où la température d'équilibre radiatif est suffisamment faible pour permettre la condensation de la poussière, et à partir duquel, le vent est accéléré par la pression de radiation sur les grains.

B. Structure des enveloppes circumstellaires

L'enveloppe circumstellaire, la plus étudiée et la mieux connue, est celle de l'étoile carbonée IRC+10216, en raison de sa proximité (100-200 pc, Zuckerman et Dyck, 1986b; Jura et Kleinman, 1989) et de son fort taux de perte de masse (quelques $10^{-5} M_{\odot}$ / an, voir par exemple Knapp et Morris, 1985). Nous décrivons ci-dessous les principales caractéristiques de cette enveloppe; nous indiquerons ensuite comment ces caractéristiques se modifient pour d'autres types d'enveloppes, en particulier celles des étoiles oxygénées.

1. IRC+10216

Les principales propriétés physiques de l'enveloppe sont déduites de la modélisation des observations radio, en particulier de l'émission CO (voir Kwan et Hill, 1977; Kwan et Linke, 1982) et des observations IR (voir Keady *et al*, 1988), car, dans le cas d'IRC+10216,

l'enveloppe est trop opaque pour permettre l'observations des raies visibles et UV formées à sa base.

Les observations IR couvrent la gamme 0.8 - 1000 μm . L'émission IR continuum permet de modéliser les propriétés de l'étoile centrale et de la poussière, alors que la spectroscopie IR donne accès aux propriétés du gaz moléculaire de l'enveloppe interne chaude.

Les observations radio, qui s'étendent sur une large fraction de la gamme 1mm - 3mm (voir la couverture spectrale d'IRC+10216 présentée dans le Chapitre 2) ont révélé l'extrême richesse du gaz moléculaire de l'enveloppe externe, plus froide, et permettent d'en déduire les propriétés physiques.

La modélisation de ces différentes observations a permis de bâtir une description assez complète de l'enveloppe (voir par exemple Omont, 1985).

On peut distinguer cinq zones dans l'enveloppe : la *couche stationnaire*, où se forme la poussière et où se développent les mécanismes d'accélération du vent, et l'enveloppe en expansion proprement dite, que l'on subdivise en *enveloppe interne* chaude, *enveloppe externe* froide et *enveloppes CO et H₂*. La structure de l'enveloppe IRC+10216, et les principaux phénomènes qui s'y manifestent, sont schématiquement représentés dans la **Figure III.2** (d'après Omont, 1985).

Structure	Enveloppe en expansion					
	Couche stationnaire	interne		externe	CO	
Paramètres Physiques	1	10	10^2	10^3	10^4	$R(R_*)$
	10^{14}	10^{15}	10^{16}	10^{17}	10^{18}	$R(\text{cm})$
	1300	500	200			$T_{\text{poussière}} (\text{K})$
	2300	1300	400	70	20	$T_{\text{gaz}} (\text{K})$
	$3 \cdot 10^{10}$	10^9	10^7	10^6	10^3	$n_H (\text{cm}^{-3})$
Rayonnement	10					
	1					
	0.1					
	A_V					
Energétique	Diffusion visible et infrarouge proche					
	Emission infrarouge continuum					
	5 μm 10 μm 100 μm					
	Formation des raies IR					
Chimie	Raies radio (CO \longrightarrow)					
	SiO H ₂ O Masers OH \longrightarrow					
	Chocs					
	Chauffage par les grains					
Chimie	Formation de la poussière					
	Chauffage photoélectrique					
	Accélération du vent					
	Refroidissement adiabatique et par les raies					
Chimie	Equilibre chimique					
	Réactions radicalaires					
	Réactions ioniques					
	Photodestruction					
Chimie	Réactions sur les grains					

Figure III.2 : La structure de l'enveloppe IRC+10216 (d'après Omont, 1985). Elle suppose les paramètres suivants : $D = 200 \text{ pc}$, $R_* = 1000 R_\odot = 7 \cdot 10^{13} \text{ cm}$, $dM/dt = 4 \cdot 10^{-5} M_\odot/\text{an}$, $n_H = 5 \cdot 10^{37} \text{ r}^{-2} \text{ cm}^{-3}$. Les émissions masers seraient celles d'une étoile oxygénée de caractéristiques analogues.

Les paramètres stellaires adoptés par Keady *et al* (1988) sont les suivants : $L_* = 2.4 \cdot 10^4 L_\odot$, et $T_{\text{eff}} = 2300 \text{ K}$, d'où un rayon $R_* \sim 1000 R_\odot$, la distance étant supposée égale à 200 pc (Claussen *et al*, 1987, indiquent une luminosité de $1.9 \cdot 10^4 L_\odot$ pour une distance de 290 pc).

Les propriétés de la poussière, en particulier la structure spatiale de l'émission infrarouge entre 1 et 5 μm (Ridgway et Keady, 1988), peuvent être modélisées par une enveloppe de rayon interne $R_i = 5 R_*$ et de rayon externe $R_e = 5000 R_*$; la poussière est constituée principalement de grains de carbone amorphe (Martin et Rogers, 1987) et de SiC (qui se manifeste par une émission à 11 μm). La densité de poussière varie en $r^{-\alpha}$ jusqu'à $r \sim 10 - 15 R_*$ (avec $\alpha >$ ou < 2 , selon que la densité est dominée par la formation des grains ou leur accélération) et en r^{-2} au-delà (Keady *et al*, 1988, Ridgway et Keady, 1988). Selon ces modèles, la température de la poussière varie approximativement selon la loi $T_d = 1300 (3R_*/r)^{0.6}$ (voir la **Figure III.3**). D'après leurs observations d'occultations lunaires à différentes fréquences, Toombs *et al*, (1972) ont élaboré un modèle d'émission thermique de la poussière, à deux composantes : un cœur de 650 K, d'un rayon de $85 R_*$ (0.2") entouré d'un halo à 375 K, d'un rayon de $400 R_*$ (1").

Le gaz moléculaire de l'enveloppe interne, qui se manifeste en particulier par les raies IR de vibro-rotation de CO en absorption, présente les caractéristiques suivantes (Keady *et al*, 1988) : un champ de vitesse d'expansion qui semble définir deux zones d'accélération (voir la **Figure III.3**), qui pourraient correspondre à la formation de divers constituants de la poussière, à $r = 3 R_*$ et à $r = 12 R_*$, et qui atteint la vitesse terminale de 14 km/s à une distance d'environ $14 R_*$, et un champ de vitesse microturbulent d'environ 1 km/s. La température du gaz est modélisée par des lois de puissance en $r^{-0.6}$ jusqu'à $r = 3 R_*$, puis une décroissance un peu plus forte, en $r^{-0.7}$, due au couplage avec les grains de poussière, jusqu'à une distance d'environ $20 R_*$, à partir de laquelle les indications des raies IR de CO deviennent peu fiables pour déterminer la température du gaz (en particulier la rupture de pente indiquée dans la **Figure III.3** n'est pas en accord avec les estimations de température cinétique du gaz établies par Keady et Ridgway, 1984, à partir d'observations de SiH_4). En supposant un rapport d'abondance $[\text{CO}]/[\text{H}_2]$ de $8 \cdot 10^{-4}$, le taux de perte de masse est de $2 \cdot 10^{-5} M_\odot / \text{an}$ et les lois de variation de la densité de H_2 et de la densité projetée de CO sont celles représentées dans la **Figure III.3**. La densité de H_2 , qui varie en r^{-2} lorsque la vitesse d'expansion est supposée constante, présente ici deux brusques décroissances dans les zones d'accélération du vent.

Le gaz moléculaire de l'enveloppe externe, modélisé grâce aux observations radio, en particulier de CO ($J=1-0$) et ($J=2-1$), (Kwan et Hill, 1977; Kwan et Linke, 1982), s'étend jusque vers $r = 1500 R_*$ ($\sim 10^{17}$ cm), et même, pour CO, moins sensible à la photodissociation par le champ UV interstellaire (voir Mamon *et al*, 1988), jusqu'à $r \sim 7000 R_*$ ($\sim 4.5 \cdot 10^{17}$ cm). La vitesse d'expansion y est constante et égale à la vitesse terminale (15 km/s). Les observations CO de Kwan et Linke sont bien reproduites par une perte de masse de $4 \cdot 10^{-5} M_\odot / \text{an}$, pour une distance de 200 pc (qui est peut-être surestimée, voir Jura et Kleinmann, 1989) et un rapport d'abondance $[\text{CO}]/[\text{H}_2]$ de $6 \cdot 10^{-4}$. La température cinétique du gaz dans l'enveloppe externe décroît en $r^{-0.7}$ pour augmenter de nouveau dans les régions les plus externes, pénétrées par le rayonnement UV interstellaire.

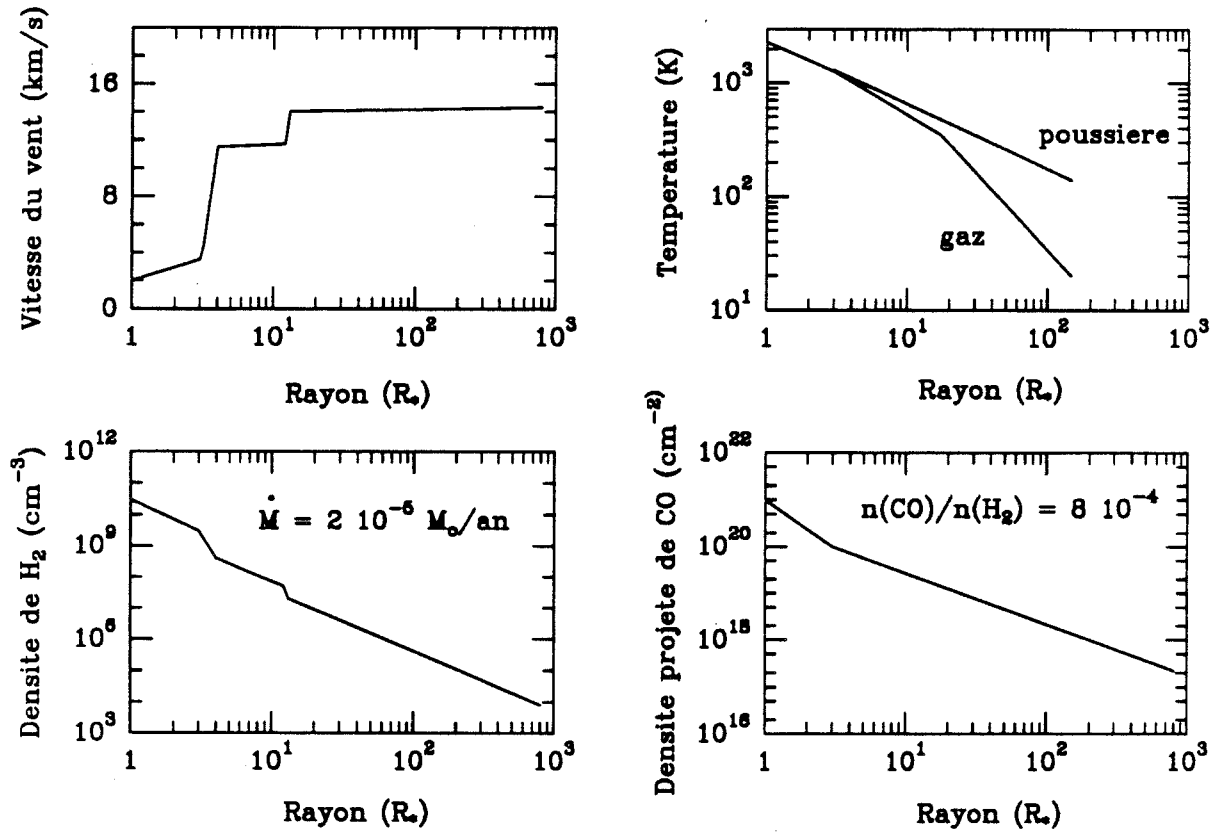


Figure III.3 : Paramètres du gaz dans le modèle de Keady et al (1988) de l'enveloppe IRC+10216. La vitesse et la température du gaz sont supposées. La température de la poussière est déterminée par la résolution des équations du mouvement de la poussière (poussée par la pression radiative) et d'équilibre radiatif. La densité volumique d'hydrogène moléculaire résulte du champ de vitesse, de l'équation de continuité et d'un taux de perte de masse de $2 \cdot 10^{-5} M_\odot / \text{an}$ et la densité projetée de CO suppose un rapport d'abondance, CO/H_2 , de $8 \cdot 10^{-4}$.

2. Les autres enveloppes

La même structure globale (couche stationnaire, enveloppe interne chaude, enveloppe externe froide) se retrouve dans les autres enveloppes avec cependant des différences quantitatives selon la luminosité de l'étoile centrale, le type de l'enveloppe,... En outre, comme nous l'avons déjà signalé, certaines enveloppes ont une géométrie qui diffère sensiblement de la symétrie sphérique.

Pour la plupart des enveloppes circumstellaires observées à ce jour en IR et en radio, (plusieurs centaines), les seuls paramètres déduits, de façon plus ou moins exacte, des observations, sont les pertes de masse de gaz et de poussière, la vitesse V_{LSR} , la vitesse d'expansion terminale, la luminosité et la distance (voir Claussen *et al*, 1987; Jura, 1988; Jura et Kleinman, 1989).

A partir des observations IRAS d'une vingtaine d'étoiles carbonées et des pertes de masses déduites des observations CO par Knapp et Morris (1985) et Knapp (1985), Jura (1986) a obtenu un rapport gaz/poussière approximativement constant (poussière/gaz = $4.5 \cdot 10^{-3}$) pour les étoiles carbonées. Cette valeur semble également en accord avec les déterminations de perte de masse de gaz et de poussière dans les étoiles de type S et oxygénées (Jura 1986, 1988). La poussière est principalement constituée de carbone amorphe dans le cas des étoiles carbonées et de silicates dans le cas des étoiles oxygénées.

L'abondance de CO par rapport à H_2 est généralement prise égale à $8 \cdot 10^{-4}$ pour les étoiles carbonées, $6 \cdot 10^{-4}$ pour les étoiles S et $3 \cdot 10^{-4}$ pour les étoiles oxygénées (voir par exemple Knapp et Morris, 1985).

C. Transfert radiatif dans les enveloppes - Formes de raies

Contrairement aux nuages moléculaires, les enveloppes circumstellaires sont caractérisées par une géométrie, un champ de vitesses, une distribution de densité et des conditions d'excitation moléculaires particulièrement simples, (au moins en première approximation), qui rendent possible la modélisation détaillée des profils de raies. Nous rappelons brièvement ci-dessous le cadre des modèles de transfert radiatif utilisés pour les

transitions moléculaires rotationnelles dans le domaine millimétrique, ainsi que les formes de raies que l'on obtient pour une enveloppe sphérique en expansion uniforme.

1. Transfert radiatif

La résolution des équations couplées de l'équilibre des populations et de l'équation de transfert se fait le plus souvent dans le cadre de l'approximation de Sobolev (traitement local du transfert, en raison du gradient de vitesse important dans l'enveloppe) (Morris 1975; Kuiper *et al*, 1976; Kwan et Hill, 1977; Morris, 1980; Kwan et Linke, 1982; Olofsson *et al*, 1982; Morris, 1985). Cependant, lorsque la largeur de raie locale ΔV , due à l'élargissement thermique et à la turbulence, n'est pas négligeable devant la vitesse d'expansion V , l'approximation de Sobolev doit être partiellement abandonnée (Nguyen-Q-Rieu *et al*, 1984; Morris *et al*, 1985). L'enveloppe est supposée sphérique, la vitesse d'expansion constante et la densité varie en r^{-2} . L'excitation des transitions moléculaires est assurée par les collisions et, principalement (sauf pour CO), par le pompage infrarouge des transitions de vibration des molécules (en particulier $v=1-0$).

2. Formes de raies

La forme des raies, exprimée en termes de température d'antenne, notée T_A^* , dépend à la fois de l'opacité de la transition et de la taille du lobe de l'antenne par rapport à l'enveloppe. Les différents cas limites sont décrits ci-dessous et les formes de raies correspondantes sont données dans la **Figure III.5**.

Dans le cadre de l'approximation de Sobolev, la température d'antenne se met sous la forme (Morris, 1975; Olofsson *et al*, 1982; Morris, 1985) :

$$T_A^*(v) = \int_0^P G(p,B) S(r) [1 - e^{-\tau(p,v)}] 2\pi p dp \quad (\text{III.16})$$

avec

$$p = r [1 - (v/V)^2]^{1/2}$$

$$P = R [1 - (v/V)^2]^{1/2}$$

et
$$\tau(p,v) = [\tau(r) / p] [1 - (v/V)^2]^{-1/2} \quad (\text{III.17})$$

où R est le rayon de l'enveloppe, r la distance au centre de l'enveloppe, p la projection de r sur le plan du ciel, v la vitesse radiale, V la vitesse d'expansion (voir la **Figure III.4**), S la fonction source et G la fonction de réponse normalisée du lobe, de largeur à mi-puissance B . La vitesse radiale v est comprise entre $-V$ et $+V$, si bien que, quelque soit la forme de la raie, sa largeur à la base est le double de la vitesse d'expansion, le profil est symétrique par rapport à la vitesse de l'étoile centrale (supposée nulle ici), et l'épaisseur optique donnée par (III.17) est minimale au centre de la raie.

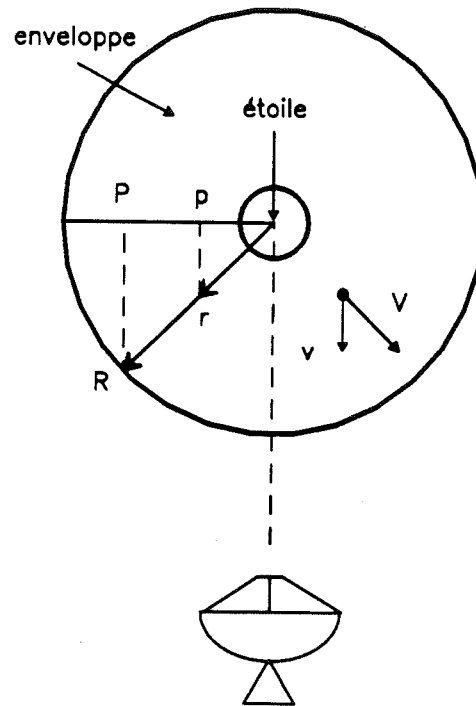


Figure III.4 : Les paramètres géométriques du modèle de transfert de rayonnement

Dans le cas d'une enveloppe non résolue, G est constante sur la taille de la source, on obtient alors

pour une transition *très optiquement mince*, un profil *rectangulaire*

$$T_A^*(v) = \int_0^R G(0,B) S(r) \tau_o(r) 2\pi r dr \quad (III.18)$$

pour une transition *très optiquement épaisse*, un profil *parabolique*

$$T_A^*(v) = G(0,B) [1 - (v/V)^2] \int_0^R S(r) 2\pi r dr \quad (III.19)$$

Il est souvent commode de regrouper ces deux résultats en modélisant les profils d'enveloppes non résolues par l'expression (Morris, 1985):

$$T_A^*(v) = T_o [1 - (v/V)^2] [1 - \exp(-\alpha \{1 - (v/V)^2\}^{-1})] / [1 - e^{-\alpha}] \quad (III.20)$$

où le paramètre α est lié à l'opacité de la raie.

Dans le cas d'une enveloppe résolue, l'effet de la réponse du lobe est de réduire la contribution au profil de l'émission des régions les plus éloignées, en projection, du centre de l'enveloppe, c'est à dire à vitesse radiale nulle. Ainsi, dans le cas optiquement mince, les profils se creusent au centre pour donner des raies "en forme de U" et dans le cas optiquement épais, les profils s'aplatissent. Dans le cas d'un lobe gaussien, les formes de raies peuvent être représentées par l'expression (III.20) multipliée par le facteur

$$\exp [-\beta^2 \{1 - (v/V)^2\}] / \exp (-\beta^2) \quad (III.21)$$

où β est le rapport du diamètre angulaire de la source à la largeur à mi-puissance B du lobe (Morris, 1985).

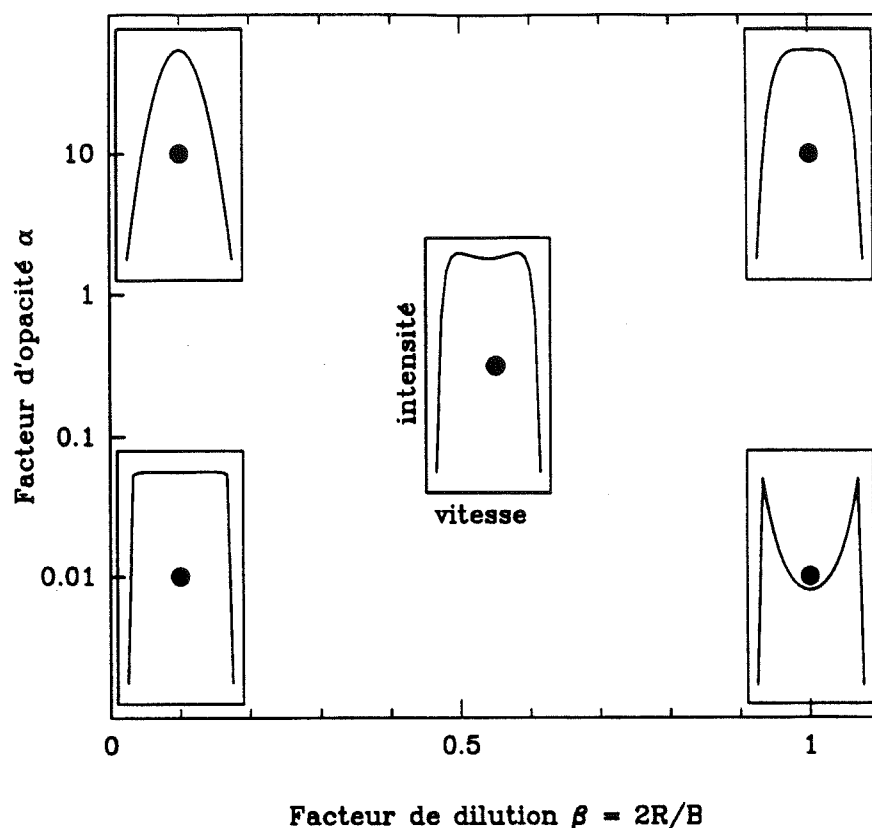


Figure III.5 : Formes de raies pour une enveloppe sphérique en expansion. Les disques noirs indiquent les valeurs des facteurs d'opacité et de dilution pour lesquels ont été calculés les profils, en suivant les expressions III.20 et III.21.

Lorsque l'on abandonne l'approximation de Sobolev, les effets de self-absorption introduisent de légères asymétries dans les profils (voir Nguyen-Q-Rieu *et al*, 1984; Morris *et al*, 1985, pour les calculs et Olofsson *et al*, 1982; Huggins et Healy, 1986, pour les observations) : le centre des raies optiquement épaisses est décalé vers le rouge et pour les raies très optiquement épaisses, un excès d'émission apparaît au pied de la raie, sur le flanc bleu; les raies optiquement minces, elles, présentent un décalage vers le rouge plus faible et dans le cas de profils "en U", le pic rouge est plus intense que le pic bleu (voir la Figure III.6).

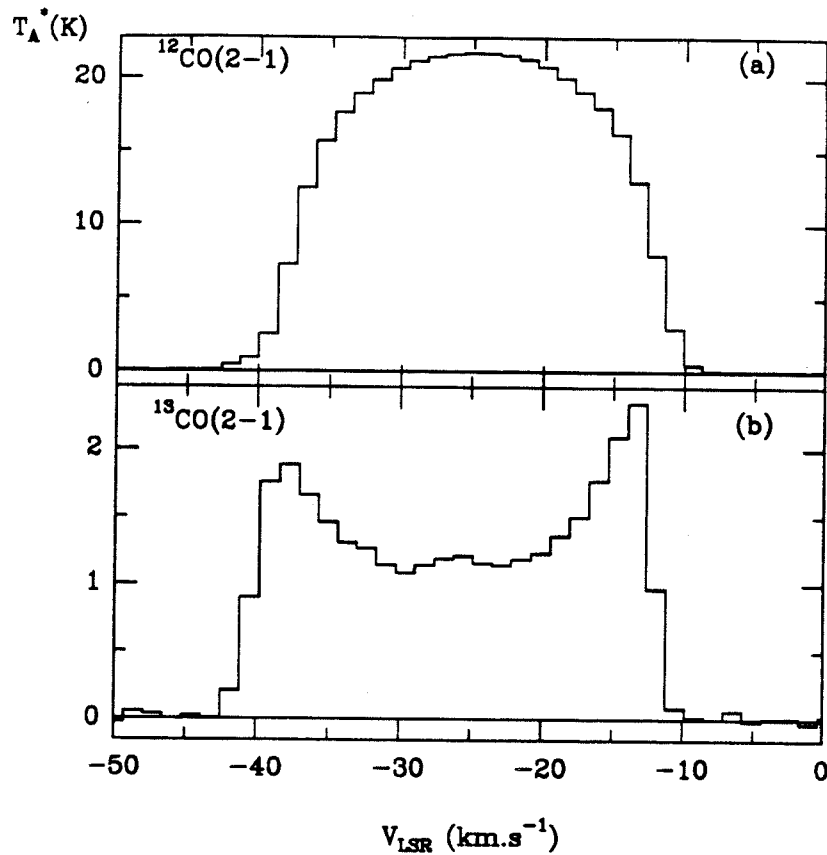


Figure III.6 : Deux exemples de raies de l'enveloppe IRC+10216 présentant des asymétries. En (a), la raie ($J=2-1$) de ^{12}CO : très optiquement épaisse, elle est décalée vers le rouge par rapport à la raie de ^{13}CO ($J=2-1$), présentée en (b)), et elle montre un léger excès d'émission au pied de son flanc bleu. L'asymétrie de la raie, optiquement mince, de l'isotope ^{13}C se manifeste très nettement par la différence d'intensité des deux "cornes": le pic bleu, auto-absorbé par l'enveloppe, est moins intense.

Nous verrons dans le prochain chapitre que les formes de raies (en U, paraboliques, rectangulaires), caractéristiques des enveloppes sphériques en expansion, fournissent de précieuses indications sur l'opacité des transitions et la taille de la région d'émission moléculaire (qui dépend, comme nous l'avons vu au Chapitre 2 dans le cas d'IRC+10216, de l'espèce considérée).

Chapitre IV

Mesure de rapports isotopiques dans les enveloppes circumstellaires

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, les produits des réactions de nucléosynthèse qui se déroulent au cœur des géantes rouges sont emportés à la surface de l'étoile lors de trois phases de mélange successives. La composition du gaz circumstellaire dépend donc des réactions nucléaires et des mécanismes de mélange et son étude constitue un test observationnel particulièrement puissant et direct des modèles d'évolution stellaire des géantes rouges. Les principaux produits des combustions de l'hydrogène, puis de l'hélium, sont les isotopes du carbone, de l'oxygène et de l'azote, dont les abondances relatives sont directement liées aux mécanismes de nucléosynthèse et de mélange mis en jeu. La détermination des rapports d'abondances chimiques comme C/O ou N/O est très délicate, car elle nécessite la comparaison des spectres d'espèces de propriétés chimiques et physiques très différentes. En revanche, la mesure des rapports isotopiques, qui ne fait intervenir que des espèces très analogues, permet, comme nous allons voir, de s'affranchir de la connaissance de nombreux paramètres et fournit donc des résultats beaucoup plus fiables et précis.

I. METHODE DE DETERMINATION DES RAPPORTS ISOTOPIQUES

La détermination d'une abondance moléculaire à partir de l'observation de raies rotationnelles nécessite, en principe, la connaissance de nombreux paramètres. Nous avons vu, à l'occasion de la présentation de la couverture spectrale d'IRC+10216, que l'aire d'une raie rotationnelle ($J \rightarrow J-1$), optiquement mince, de température d'excitation T_{ex} , se met sous la forme :

$$W \text{ (K.km/s)} = (8 \pi^3 \nu / 3 k) (J/2J+1) \mu^2 N_u [1 - B_v(T_{bg})/B_v(T_{ex})] \quad (\text{IV.1})$$

où N_u est la densité projetée de molécules dans le niveau supérieur, μ le moment dipolaire de la transition, de fréquence ν , et T_{bg} , la température du fond continu à la fréquence de la raie. On peut, de même, exprimer la température de brillance au centre de la raie par :

$$T_B \text{ (K)} = (8 \pi^3 \nu^2 / 3 k c) (J/2J+1) \mu^2 N_u [1 - B_\nu(T_{bg})/B_\nu(T_{ex})] (\alpha / \Delta\nu) \quad (\text{IV.2})$$

où $\Delta\nu$ est une largeur caractéristique de la raie (dans le cas d'une enveloppe sphérique en expansion à la vitesse V_{exp} , $\Delta\nu = 2 V_{exp}$) et α un facteur numérique, de l'ordre de 1, qui dépend de la forme précise de la raie.

Pour en déduire la densité projetée de la molécule, il faut déterminer la température d'excitation et la répartition des populations dans les différents niveaux rotationnels (on suppose le plus souvent une distribution boltzmannienne) et si l'on veut comparer les abondances de deux molécules, il est en outre nécessaire de connaître l'extension de l'émission de chacune, le long de la ligne de visée, afin de passer des densités projetées aux densités volumiques.

Dans le cas où l'on s'intéresse à des rapports d'abondances isotopiques, le problème se simplifie généralement beaucoup : (i) les isotopes ont le plus souvent la même répartition spatiale (sauf cas particulier, comme CO et ses isotopes par exemple, dont les photodissociations sont sélectives); (ii) les isotopes ont des spectres analogues et des fréquences très voisines (sauf dans le cas où la substitution isotopique brise une symétrie); (iii) les niveaux d'énergie des isotopes sont voisins, si bien qu'il est souvent légitime de considérer que les conditions d'excitation des isotopes sont semblables (il faut cependant se méfier du cas des molécules excitées par pompage radiatif, dont les transitions infrarouges peuvent présenter des opacités très variables selon les isotopes); (iv) les moments dipolaires des isotopes peuvent, en très bonne approximation, être considérés comme égaux.

Si les raies sont optiquement minces, on peut donc déduire directement du rapport des aires ou des températures de brillance au centre des raies des isotopes, une mesure de leur rapport d'abondance. Si, de plus, l'abondance des isotopes n'est pas affectée par des mécanismes de fractionnement chimique, elle reflète fidèlement l'abondance isotopique des éléments. On peut alors calculer l'abondance isotopique élémentaire $[X_1] / [X_2]$ par les relations :

$$[X_1] / [X_2] = (\int T_{B1} dv / \int T_{B2} dv) (v_1 / v_2)^{-1} \quad (IV.3)$$

ou

$$[X_1] / [X_2] = N_{u1} / N_{u2} = (T_{B1} / T_{B2}) (v_1 / v_2)^{-1} \quad (IV.4)$$

Lorsque les transitions rotationnelles ne sont pas optiquement minces, les relations (IV.1) et (IV.2) ne fournissent que des limites inférieures de la densité projetée des molécules, et la limite fournie par la relation (IV.2), est plus proche de la densité projetée véritable de la molécule car l'opacité de la raie est minimale en son centre. Dans de nombreux cas de détermination de rapports isotopiques, l'un des isotopes est beaucoup plus abondant que l'autre, si bien que les raies rotationnelles de l'isotope le plus rare sont optiquement minces, alors que les raies de l'isotope principal sont optiquement épaisses; le rapport des températures de brillance au centre des raies fournit alors, en appliquant la relation (IV.4), une limite au rapport d'abondances des molécules. La détermination du rapport d'abondances corrigé des effets d'opacité demande, elle, une modélisation plus poussée de l'intensité des raies (voir par exemple Wannier et Sahai, 1987) ou nécessite de passer par l'intermédiaire d'un double rapport isotopique ne faisant intervenir que des raies optiquement minces (par exemple, $[^{12}\text{C}]/[^{13}\text{C}] = [^{12}\text{C}^{34}\text{S}]/[^{13}\text{C}^{32}\text{S}] \cdot [^{32}\text{S}]/[^{34}\text{S}]$, comme dans le cas de la mesure du rapport isotopique du carbone dans l'enveloppe IRC+10216, que nous verrons dans l'article qui suit).

Nous avons déjà évoqué, précédemment, les difficultés de détermination des températures de brillance à partir des températures d'antenne observées (calibration, dilution dans le lobe). C'est, après le problème d'opacité des raies (dont on peut parfois s'affranchir par un choix judicieux des molécules utilisées), la principale cause d'incertitude sur les rapports isotopiques que l'on détermine à partir des raies rotationnelles des molécules. La qualité de la calibration dépend bien sûr du récepteur et du télescope utilisés (ainsi probablement que de l'observateur !); dans l'article qui suit, nous discutons, de façon détaillée, notre estimation des incertitudes de calibration des observations réalisées avec le 30m de l'IRAM; des méthodes tout à fait analogues ont été employées pour estimer les incertitudes de calibration des autres observations exposées dans ce chapitre.

La dilution dans le lobe introduit "au pire", c'est à dire dans le cas d'une source ponctuelle, un facteur correctif $(v_1 / v_2)^{-2}$ au rapport calculé par (IV.3) ou (IV.4), cette correction reste donc petite dans le cas d'isotopes, qui ont des fréquences de transitions très

proches. En outre, le calcul du facteur correctif nécessite la connaissance précise de la taille et de la géométrie de la source (qui dépend de la molécule considérée, voir le chapitre 2 à ce sujet). Pour toutes les déterminations de rapports isotopiques exposées dans ce chapitre, selon les enveloppes, soit nous négligerons simplement ce facteur correctif (ce qui revient à supposer que la source est parfaitement résolue par les observations), soit nous supposerons que la source est ponctuelle, ce qui introduit un facteur correctif en v^{-2} (pour choisir entre les deux alternatives, nous nous aidons des formes de raies, qui, comme nous l'avons vu précédemment, fournissent des indications sur les tailles respectives du lobe du télescope et de la source).

II. CARBONE, AZOTE, SOUFRE ET SILICIUM DANS L'ENVELOPPE IRC+10216

Grâce à sa proximité et à la forte perte de masse de l'étoile centrale, l'enveloppe IRC+10216 est caractérisée par des raies moléculaires intenses, si bien qu'il est possible d'y détecter les isotopes rares de nombreux éléments. En outre, un grand nombre de molécules présente une émission résolue par le télescope de 30m de l'IRAM, même à 3mm, si bien que la distinction entre les profils des raies optiquement minces (en U) et optiquement épaisses (paraboliques) est particulièrement aisée.

L'article qui suit est consacré à la mesure des rapports isotopiques du carbone ($^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$), de l'azote ($^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$), du soufre ($^{32}\text{S}/^{34}\text{S}$, $^{32}\text{S}/^{33}\text{S}$) et du silicium ($^{28}\text{Si}/^{29}\text{Si}$, $^{28}\text{Si}/^{30}\text{Si}$) dans l'enveloppe IRC+10216; la mesure des rapports isotopiques de l'oxygène est, elle, exposée à la fin du chapitre.

Les rapports isotopiques que nous avons déterminés dans IRC+10216, reposent exclusivement sur l'observation de raies rotationnelles millimétriques identifiées comme optiquement minces, grâce à leur forme caractéristique (en U pour la plupart des molécules, dont l'émission est étendue, rectangulaire pour quelques espèces, en particulier les molécules siliciées SiO et SiS, dont l'émission est à peine résolue).

Quelle que soit la molécule considérée, les isotopes rares du silicium (^{29}Si et ^{30}Si) et du soufre (^{34}S et ^{33}S) présentent des émissions optiquement minces; la détermination des rapports isotopiques est donc directe, et nous avons vérifié que les diverses espèces utilisées, (SiCC, SiS et SiO d'une part, CS et SiS, de l'autre), fournissent des rapports d'abondances isotopiques en excellent accord les uns avec les autres, ce qui exclut des biais dus au fractionnement chimique ou à des excitations moléculaires anormales, de type maser (signalons, tout de même, que la transition $J=1-0$ de SiS peut présenter une émission maser, mais un tel effet n'a jamais été observé pour les transitions de J plus élevés, dont il est question ici). Nous concluons que les rapports isotopiques ainsi déterminés, reflètent fidèlement les rapports isotopiques élémentaires. Les rapports isotopiques faisant intervenir l'isotope principal du silicium, ^{28}Si , peuvent être déterminés grâce aux transitions, optiquement minces, de SiS et SiCC, mais il faut exclure SiO, dont les raies présentent des épaisseurs optiques non négligeables (il n'est pas exclu que certaines transitions au moins de SiCC soient également un peu optiquement épaisses). La détermination des rapports isotopiques $[^{32}\text{S}]/[^{34}\text{S}]$ et $[^{32}\text{S}]/[^{33}\text{S}]$, ne repose que sur une seule espèce, SiS, car l'isotope principal de CS présente des raies optiquement épaisses.

Pour déterminer le rapport $[^{12}\text{C}]/[^{13}\text{C}]$, qui est voisin de 50, nous avons dû, pour n'utiliser que des raies optiquement minces, passer par l'intermédiaire du double rapport $[^{12}\text{C}][^{34}\text{S}] / [^{13}\text{C}][^{32}\text{S}]$, le rapport isotopique du soufre étant mesuré par ailleurs. La valeur obtenue, à partir des transitions de $^{12}\text{C}^{34}\text{S}$ et de $^{13}\text{C}^{32}\text{S}$, est en accord avec les limites inférieures fournies par les espèces dont l'isotope principal présente des raies optiquement épaisses (CS, HC_3N) ainsi qu'avec les rapports, plus incertains, fournis par des molécules dont l'isotope principal présente des raies optiquement minces, mais dont l'isotope ^{13}C est à peine détecté (HNC, C^{34}S).

En ce qui concerne les isotopes de l'azote, nous ne pouvons fournir qu'une limite inférieure au rapport $[^{14}\text{N}]/[^{15}\text{N}]$: la seule molécule azotée présentant une émission suffisamment intense pour que l'isotope ^{15}N soit détectable, est HCN. L'isotope principal est très optiquement épais et l'isotope H^{13}CN est lui même encore trop optiquement épais pour que la méthode du double rapport isotopique puisse fournir autre chose, qu'une limite, au rapport isotopique de l'azote.

Dans le cas du soufre et du silicium, les rapports isotopiques que nous avons obtenus présentent une précision bien supérieure à celle des mesures précédemment publiées. Les valeurs sont très voisines des rapports terrestres, ainsi que l'on attend dans l'enveloppe d'une étoile froide, qui n'a pas connu les réactions de synthèse explosive qui forment les isotopes du soufre et du silicium (Geballe *et al.*, 1979; Penzias, 1981a).

Dans le cas de l'azote, la limite inférieure du rapport $[^{14}\text{N}] / [^{15}\text{N}]$ que nous déterminons, (4400), indique un accroissement d'un facteur au moins égal à 15, par rapport à la valeur terrestre. Cette surabondance relative de ^{14}N résulte, comme nous l'avons vu, de l'apport à la surface de l'étoile du ^{14}N produit par la combustion de l'hydrogène, puis par celle de l'hélium.

Dans le cas du carbone, les valeurs du rapport isotopique $[^{12}\text{C}] / [^{13}\text{C}]$ antérieures à notre mesure, déterminées, soit par des observations radio, soit par des observations infrarouges, étaient significativement plus faibles que la valeur que nous avons obtenue, (47^{+6}_{-5}). Cette tendance s'explique par l'opacité des raies radio et infrarouge des isotopes ^{12}C des molécules utilisées (CO, HCN, CS), qui conduit à sous-estimer l'abondance des isotopes principaux de ces molécules et donc le rapport $[^{12}\text{C}] / [^{13}\text{C}]$. Lorsque le rapport d'abondance est déterminé grâce à une modélisation de l'excitation des raies ($J=2-1$ et $J=1-0$) de ^{12}CO et ^{13}CO (Wannier et Sahai, 1987), sa valeur, (48^{+15}_{-12}), est en très bon

accord avec la nôtre (les barres d'erreur, relativement importantes, sont, dans ce cas, dominées par les incertitudes de la modélisation).

Cette mesure du rapport isotopique du carbone prouve qu'il y a eu enrichissement en ^{13}C , par rapport aux valeurs terrestres et interstellaires, ainsi que l'on attend, en raison des processus de mélange (voir le chapitre 3) qui modifient la composition isotopique à la surface de l'étoile. Cependant, dans l'enveloppe IRC+10216, cet enrichissement est faible par rapport à celui que l'on observe dans d'autres étoiles carbonées, et surtout dans les étoiles S et oxygénées (voir les mesures infrarouges de Harris et Lambert, 1984; Harris *et al*, 1985, 1988; Lambert *et al*, 1986). Il est vraisemblable que l'enveloppe de cette étoile, qui se trouve dans un état d'évolution assez avancé le long de la branche AGB, a déjà connu, après les phases d'enrichissement en ^{13}C du premier et du deuxième processus de mélange, un apport en ^{12}C important, en provenance du cœur de carbone de l'étoile.

Carbon, nitrogen, sulfur and silicon isotopic ratios in the envelope of IRC + 10216

C. Kahane¹, J. Gomez-Gonzalez^{2,3}, J. Cernicharo^{1,2}, and M. Guélin²

¹ Groupe d'Astrophysique, Observatoire de Grenoble, Université Scientifique Technologique et Médicale de Grenoble, CERMO, BP 68, F-38402 St. Martin d'Hères Cedex, France

² IRAM, Domaine Universitaire de Grenoble, Voie 10, F-38406 St. Martin d'Hères, France, and Av. Divina Pastora 7, Granada, Spain

³ Centro Astronomico de Yebes, OAN, Apartado 148, E-19014 Guadalajara, Spain

Received December 15, 1986; accepted June 22, 1987

Summary. Using high sensitivity observations of optically thin lines, made at 2 mm and 3 mm with the IRAM 30 m telescope, we have made a redetermination of the carbon, sulfur and silicon elemental isotopic ratios in the envelope of the carbon star IRC + 10216. Except for ^{14}N , ^{15}N , which was estimated only from H^{13}CN and HC^{15}N observations, each ratio was derived from two or three different molecules; in all cases, the molecular isotopic ratios were found to be consistent. The silicon and sulfur isotopic ratios are found to be very close to their solar system values. The carbon ^{12}C , ^{13}C ratio is smaller than the terrestrial elemental ratio by almost exactly a factor of 2. ^{15}N is underabundant relative to ^{14}N by at least a factor of 15. These carbon and nitrogen ratios reflect the isotopic enrichments expected for a late-type star.

Key words: molecules-stars; circumstellar matter – interstellar medium; abundances, nucleosynthesis

1. Introduction

The formation of the heavy elements ($A > 12$) is believed to have occurred in the interior of massive stars, these elements being subsequently expelled into the interstellar gas via nova and supernova explosions or, more gently, via stellar winds. The observation of the nucleosynthetic products ejected during these events, and the comparison of their relative abundances with those observed in the solar system and interstellar medium, offer a unique chance of understanding the chemical evolution of the Galaxy.

From available data, it appears that the winds from evolved stars carry a large fraction of the processed matter returned to the interstellar medium (see for instance Dupree, 1986). More specifically, cool red giants with large mass loss rates (C, S, and M stars) expel enough material to change the "chemical" composition of the interstellar gas. This material, prior to mixing with the surrounding gas, is ejected into expanding shells, whose molecular composition can be accurately analyzed with present infrared and radio techniques (see e.g. Zuckerman, 1980). Of special interest are isotope abundance measurements in such shells: as long as the

same transition is observed for the various isotopes of a single molecule, the isotopic abundance ratios can be determined almost independently of the physical and chemical conditions in the shell. These ratios, which often critically depend on the physical conditions in the cores of the stars where the isotopes were formed, are convenient tracers of the nucleosynthetic history of the gas.

Studies of isotopic ratios in circumstellar envelopes, using infrared and radio techniques, are in a state of rapid growth (see Wannier, 1985). Until recently, however, they have been largely restricted to the bright envelope of the nearby carbon star IRC + 10216. Even there, radio studies have mainly dealt with the most intense lines, which are optically thick, and have often yielded limits rather than actual values on the main isotopic abundance ratios. The present study, which benefits from the high sensitivity of the 30 m IRAM telescope, is a first attempt to derive reliable values of the circumstellar isotopic ratios by observing optically thin radio lines. We report here observations of carbon, nitrogen, sulfur and silicon isotopes of HCN, HNC, HC_3N , CS, SiO, SiS, and SiCC in IRC + 10216. They include the first detection of C^{33}S , Si^{33}S , HN^{13}C , and $^{13}\text{C}^{34}\text{S}$ in that source, as well as Si^{13}CC (see Cernicharo et al., 1987) and a tentative detection of C^{13}CH .

2. Observations and data reduction

Our data were obtained with the Institut de Radioastronomie Millimétrique (IRAM) 30 m telescope at Pico Veleta, Spain, between October 1985 and May 1987. The telescope was equipped with 3 mm and 2 mm SIS receivers with a typical single sideband (SSB) temperature of 160–200 K. The observations were made in SSB or DSB mode. In the last case, the signal-to-image gain ratio was checked by observing strong lines with and without an image rejection filter. [The observing procedure has been described by Guélin et al. (1986)]. During most of the observations, the weather was clear and the zenith atmospheric opacity below 0.1 at 3 mm (0.15 at 2 mm). The temperatures reported on the spectra of Figs. 1–7 and in Table 2 (denoted T_A^*) are effective single sideband antenna temperatures above the atmosphere. They are related to the main beam averaged brightness temperatures T_B by $T_A^* \approx 0.6 T_B$.

Send offprint requests to: C. Kahane

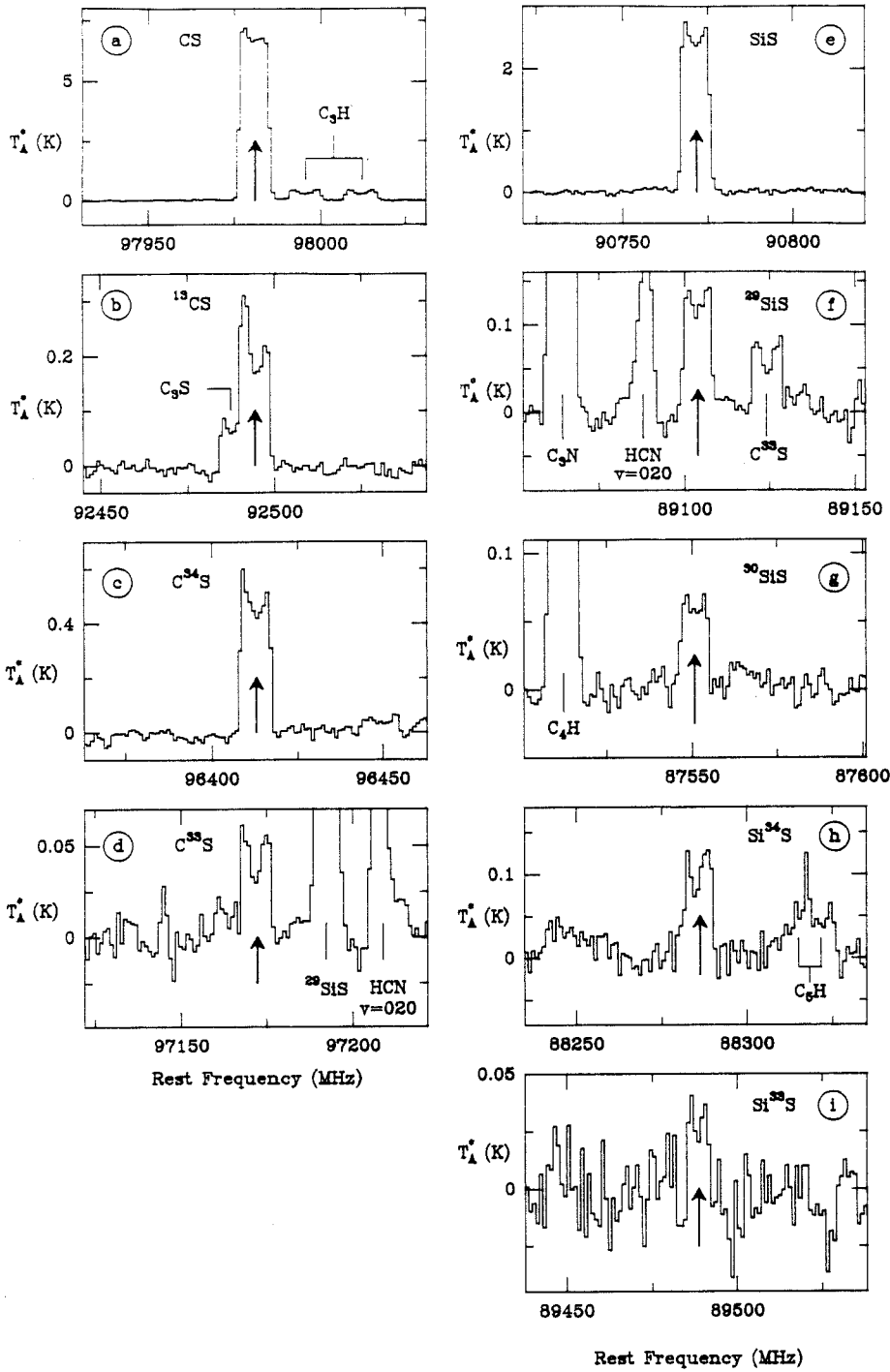


Fig. 1a-i. The CS ($J=2-1$) isotopes (a-d) and the SiS ($J=5-4$) isotopes (e-i) observed with the IRAM 30 m telescope in the IRC +10216 molecular envelope. The spectral resolution is 1 MHz; it corresponds to a velocity resolution of about 3 km s^{-1} at a frequency of 90 GHz. The arrows indicate the line frequencies reported in Table 1. The ^{13}CS line appears partially blended with another line. The spectra plotted in d and f are image and signal sidebands of the same frequency. This observation has already been reported by Lucas et al. (1986). Note that the SiS line (e) presents a clear U-shape, indicative of a low opacity

To estimate the calibration error (atmospheric stability, receiver sideband ratio, ...), each observation was repeated several times during independent sessions. In the DSB mode, there was always at least one strong line in the spectral band covered by the $512 \times 1 \text{ MHz}$ filterbank. At 3 mm, the intensity of this line was found to be reproducible within 20%, peak to peak, between the different sessions, a scatter which reflects the relative calibration uncertainty (30% at 2 mm). The data discussed below result from the average of these independent observations and present a calibration uncertainty at 3σ of less than 20% at 3 mm and 30% at

2 mm. The 1 sigma error bars reported in Table 2 take into account both the calibration uncertainties and the receiver noise.

It is worth noting that, when allowance is made for the difference in telescope angular resolution and the size of the molecular emission region (assumed to be $\approx 20''-30''$ FWHM), the intensities of the strong lines of our survey agree usually well with those reported in the Onsala spectral survey (Johansson et al., 1984a, b).

The line profiles observed with the 30 m telescope are plotted in Figs. 1-5. Rest frequencies are listed in Table 1 and intensities

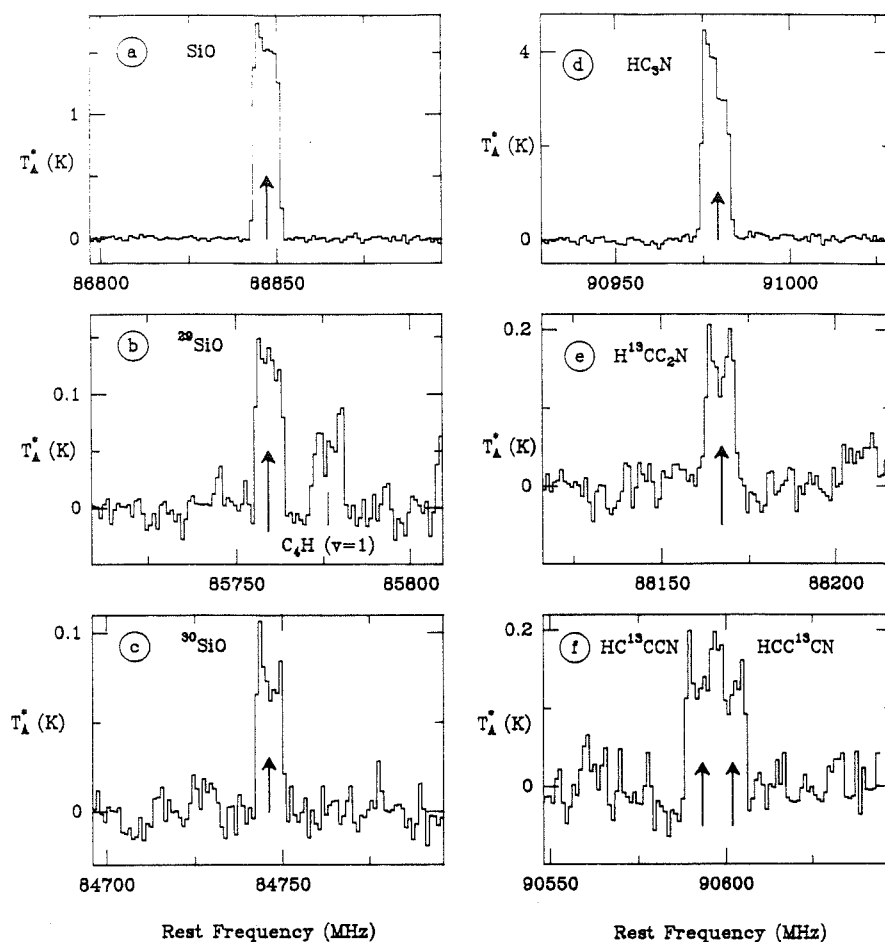


Fig. 2a-f. The same as Fig. 1 for the SiO ($J=2-1$) isotopes (a-c) and the HC₃N isotopes (d-f). The two isotopes of Fig. 2f, HC¹³CCN and HCC¹³CN appear to blend each other

given in Table 2. To our knowledge, the spectra plotted in Figs. 1d, 1i, and 3e are the first detections of C³³S, Si³³S, and HN¹³C in the envelope of IRC + 10216. The assignment of the weak and very broad line in Fig. 4b to a blend of C¹³CH hyperfine (hf) components is still tentative. The rest frequencies of the Si³³S and C¹³CH lines have been calculated assuming an LSR central velocity of -27 km s^{-1} for the envelope.

The first difficulty encountered in deriving isotopic ratios from line brightness temperatures arises from the optical thickness of the lines, which usually leads to underestimates of the abundances of the most abundant isotopes.

When observed with a sufficient sensitivity, molecular emission from IRC + 10216 exhibits line profiles (referred to below as round topped or *U*-shaped) characteristic of an expanding shell. The reasonably well known geometrical and kinematical properties of this source make the interpretation of the line shapes fairly straightforward in terms of line opacity (see for instance Olofsson et al., 1982), so that one can avoid using lines recognized as optically thick, or, at least, be aware of their optical thickness in deriving isotopic ratios. One type of shell profile can unambiguously be identified as optically thin, at least when no anomalous excitation process, such as maser pumping, occurs: the *U*-shaped profiles of weak lines. In contrast, round topped profiles can either be due to spatially unresolved, optically thin emission or to optically thick emission. Due to the good signal to noise ratio of most of our spectra (in particular for the strong lines, which are

likely to be optically thick), the line shapes are clearly defined and can be fitted by "shell type" profiles, which are simply truncated parabolas. The results of the fits are given in Table 2 and an example of a composite shell-type profile fit is plotted in Fig. 6.

The rare isotopes of CS, HC₃N, and HNC (Figs. 1-5) all have weak *U*-shaped lines, typical of optically thin and resolved emission. For these species, the molecular source must be larger than the antenna beam (we measure for CS and HCN sources of size $\approx 25''$). Similarly, the abundant isotopes HNC and CCH also exhibit *U*-shaped lines with moderate intensities (1-2 K), which must arise from extended sources and are probably optically thin.

The lines of the rare SiS isotopes, which have slightly marked *U*-shaped profiles at low frequencies (see Fig. 1e-i), are formed in a source smaller than the beam (we measure a source size $\approx 12''$). They are weak and must be optically thin. The $J=5-4$ line of the main SiS isotope has exactly the same shape as those of the rare isotopes and, despite its larger intensity, is probably also optically thin.

The CS (3-2) and (2-1) lines and the SiS (8-7) line present asymmetric profiles, an effect interpreted by Morris et al. (1985) as due to self-absorption. The ¹²CS lines are likely to be optically thick, the ¹²CS line intensity being almost equal for the (2-1) and the (3-2) lines. In contrast, the rare CS isotopes and all the SiS isotopes present a significant intensity enhancement (by a factor of 1.5-3) from low to high frequency, indicative of small optical depth.

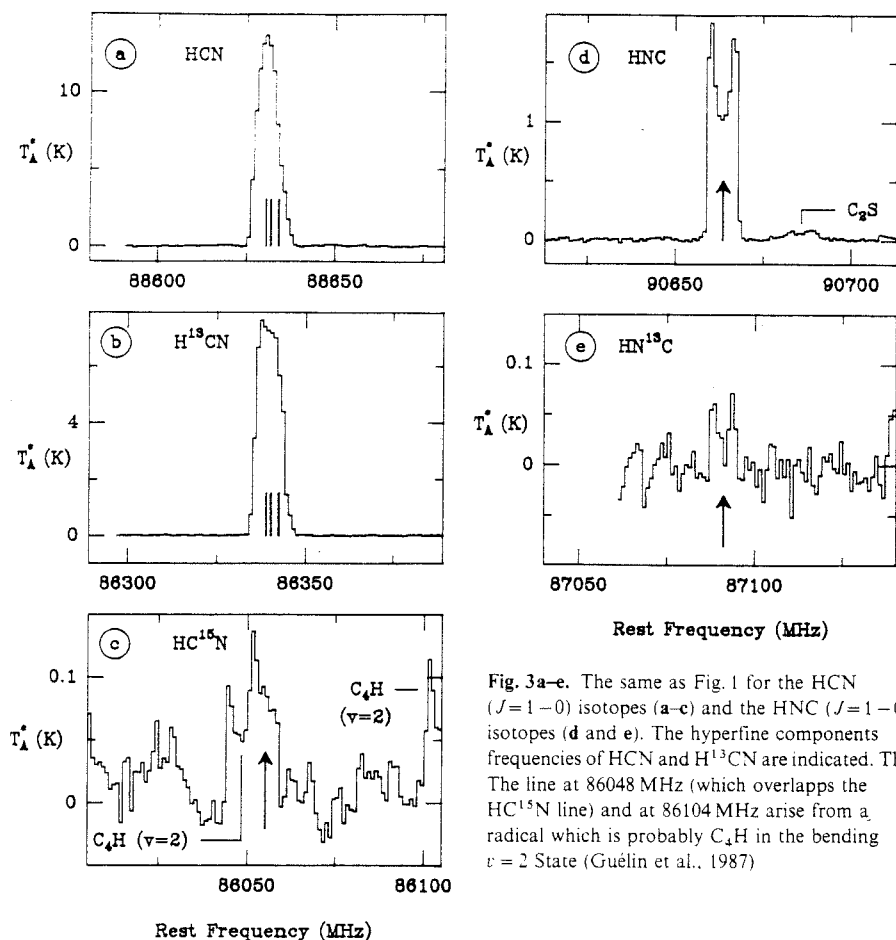


Fig. 3a-e. The same as Fig. 1 for the HCN ($J=1-0$) isotopes (a-c) and the HNC ($J=1-0$) isotopes (d and e). The hyperfine components frequencies of HCN and H^{13}CN are indicated. The line at 86048 MHz (which overlaps the HC^{15}N line) and at 86104 MHz arise from a radical which is probably C_4H in the bending $v=2$ State (Guélin et al., 1987)

The round topped line observed for the abundant isotope of HC_3N looks quite different from the deep U-shaped lines of this molecule's rare species and must be optically thick. Its intensity (3.5 K) is in fact only a factor of 3-4 smaller than those of the optically very thick CO and HCN lines (12-13 K).

Finally, the line opacity of the main ^{28}SiO isotope is more difficult to estimate, since the shape of the ^{29}SiO and ^{30}SiO lines is ill defined. Judging from the average profile of the latter two lines, the line of the main isotope seems optically thick.

Depending on line opacities, the molecular abundance ratios have been derived from the velocity-integrated intensities or from the intensities at the center of the line given by shell profile fits. For ratios involving an optically thick line, the center-of-line ratio is closer to the line opacity ratio (hence to the abundance ratio), since the optical depth is smaller at the line center. For optically thin lines, both ratios are equal and closely reflect the abundance ratio; the integrated intensity ratio, which is more accurately determined, is then to be preferred. In all cases, the values of both ratios have been reported in Table 2, (the data for the SiCC isotopes come from Cernicharo et al., 1986).

Even for optically thin lines involving analogous transitions of two isotopes of the same molecule, the line intensity ratio differs slightly from the abundance ratio for three reasons: the change in line excitation, the frequency dependence of the transition strengths, and the change in beam dilution. We now discuss these three effects in some details. In IRC+10216, absorption of infrared photons, emitted by hot dust in the inner envelope,

contributes efficiently to the excitation of the rotational levels of polar molecules, as attested by the observation of CS, SiS, and HC_3N in vibrationally excited states (Blundell et al., 1987). The abundance difference between isotopes affects the infrared line opacities and may cause large differences in the excitation of the microwave lines. This effect is important only for radiatively excited species with large infrared opacities. It usually tends to decrease the line intensity of the more abundant isotope (at least for the lines arising from low energy levels) and can be neglected for the lines of the rare isotopic species discussed below. Note that the intensity ratios of Table 3 were derived for pairs of lines observed during the same week to avoid possible intensity variations related to changes in IR radiation.

The change in transition strength introduces a factor proportional to v^2 in the line intensities and affects the microwave as well as the infrared transitions. The difference in microwave transition strength is small, $\approx 5-6\%$, except in the case of the double ratio $\text{C}^{34}\text{S}/^{13}\text{CS}$, where it reaches 8%. It has been taken into account in the calculations of the abundance ratios of Table 3. The difference in infrared transition strengths affects the excitation of the microwave lines, but only for radiatively excited species. Its effect usually goes in the direction opposite to the preceding one, but its magnitude is smaller; it is hard to evaluate without a detailed model of the source and, consequently, has been neglected.

The beam dilution factor, which results from a change in antenna beam size, is difficult to calculate because it depends on the source size, thus varies from one molecule to the other. This

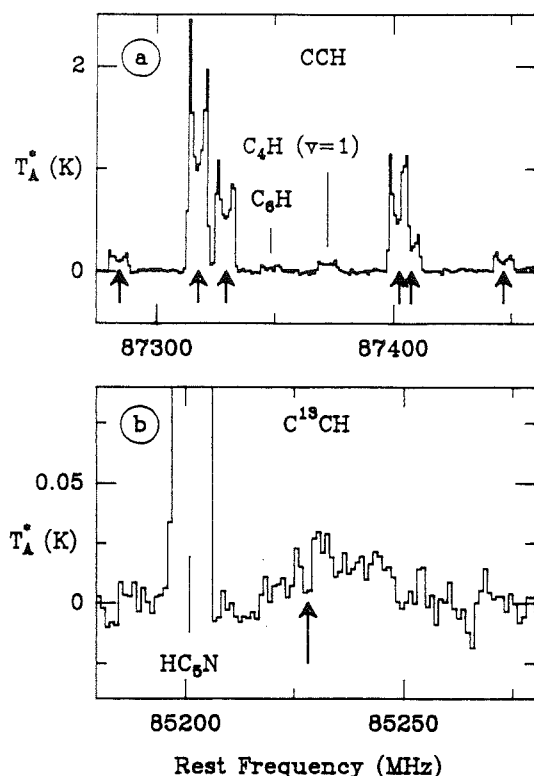


Fig. 4. a shows the six hyperfine components of CCH ($N=1-0$) while the broad feature in the middle of b is tentatively assigned to a blend of several hyperfine components of $C^{13}CH$ (the arrow indicates a rough estimate of the expected frequency of the main hyperfine component)

effect is even smaller than the previous ones: in the extreme case of SiS, for which we observe a source size of only $12''$, the change in beam dilution factor from $^{28}\text{SiS } J=5-4$ to $^{30}\text{SiS } J=5-4$ is 3–4%. It has been taken into account by the introduction of an additional uncertainty of 3% in Table 3.

3. Discussion

3.1. The $[^{28}\text{Si}]/[^{29}\text{Si}]$, $[^{28}\text{Si}]/[^{30}\text{Si}]$, and $[^{29}\text{Si}]/[^{30}\text{Si}]$ ratios

The first estimate of the $[^{28}\text{Si}]/[^{29}\text{Si}]$ ratio has been made by Olofsson et al. (1982) from ^{28}SiO and $^{29}\text{SiO } J=2-1$ line intensity measurements made with the Onsala 20 m telescope. Due to the low signal-to-noise ratio of these observations, the line shapes were ill-defined and the authors incorrectly assumed that the main isotope line was probably optically thin. They derived an isotopic ratio of 16 ± 3 , which is actually only a rough lower limit.

Combining observations of the ^{28}SiS and $^{29}\text{SiS } J=5-4$ lines, made with the Onsala telescope (Johansson et al., 1984b), with those of the $^{30}\text{SiS } (J=5-4)$ line made with the 14 m Five College Radio Astronomy Observatory (FCRAO) telescope, Ziurys et al. (1984) derived that the $[^{28}\text{SiS}]/[^{30}\text{SiS}]$ and $[^{29}\text{SiS}]/[^{30}\text{SiS}]$ ratios were respectively 31 and 1.3. Due to low signal to noise ratio and to the large uncertainties inherent in the comparison of observations made with different telescopes, the uncertainty on these values is however very large.

We have observed several transitions of each silicon isotope of SiO, SiS, and SiCC. Considering only optically thin lines, we derive the values listed in Table 3: the isotopic ratios derived from the three molecular species are in very good agreement, which confirms that the abundance ratios are not affected by optical depth effects. This probably indicates that Si-bearing molecules are not sensitive to isotopic fractionation and that the molecular abundance ratios faithfully reflect the elemental isotopic ratios.

The average isotopic ratio values we derive, using $1 \sigma^2$ weights, are reported in Table 4. They are much more accurate than

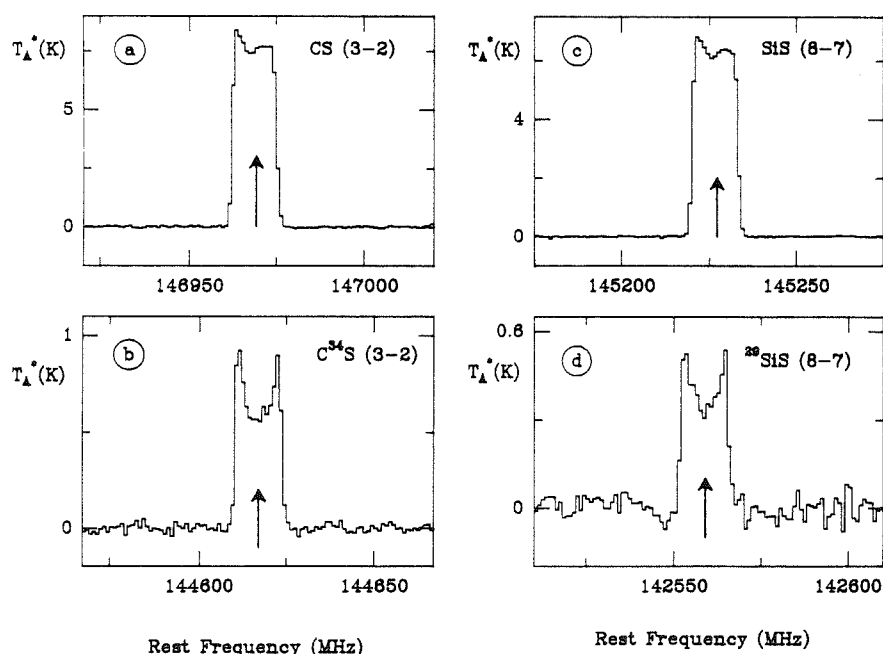


Fig. 5. Two CS (3–2) isotopes (a and b) and two SiS (8–7) isotopes (c and d) observed in the 2 mm range with the IRAM 30 m telescope. The spectral resolution is 1 MHz; it corresponds to a velocity resolution of about 1.8 km s^{-1} at a frequency of 140 GHz. Note that the rare isotopes lines show U-shape profiles indicative of optically thin emission; in contrast the CS and SiS main isotopes present identical asymmetric profiles, due to larger opacity (see text)

Table 1

Molecule ⁽¹⁾	Transition	Frequency (MHz)	Ref. ⁽²⁾
¹² C ³² S	J = 2-1	97980.968	1
	J = 3-2	146969.049	1
¹³ C ³² S	J = 2-1	92494.299	1
	J = 3-2	138739.309	1
¹² C ³⁴ S	J = 2-1	96412.982	1
	J = 3-2	144617.147	1
¹² C ³³ S	J = 2-1	97172.086	1
¹³ C ³⁴ S	J = 3-2	136386.990	1
²⁸ Si ³² S	J = 5-4	90771.546	1
	J = 8-7	145226.965	2
²⁹ Si ³² S	J = 5-4	89103.730	1
	J = 8-7	142558.72	2
³⁰ Si ³² S	J = 5-4	87550.545	1
	J = 8-7	140073.887	2
²⁸ Si ³⁴ S	J = 5-4	88285.809	1
	J = 8-7	141250.194	2
²⁸ Si ³³ S	J = 5-4	89488.4	3
	J = 8-7	143175.465	2
²⁸ Si ¹⁶ O	J = 2-1 v = 0	86846.998	1
²⁹ Si ¹⁶ O	J = 2-1 v = 0	85759.132	1
³⁰ Si ¹⁶ O	J = 2-1 v = 0	84746.036	1
H ¹² C ¹² C ¹² C ¹⁴ N	J = 10-9	90978.993	1
H ¹³ C ¹² C ¹² C ¹⁴ N	J = 10-9	88166.808	1
H ¹² C ¹³ C ¹² C ¹⁴ N	J = 10-9	90593.059	1
H ¹² C ¹² C ¹³ C ¹⁴ N	J = 10-9	90601.791	1
H ¹² C ¹⁴ N	J = 1-0 F = 1-1	88630.416	1
	F = 2-1	88631.847	1
	F = 0-1	88633.936	1
H ¹³ C ¹⁴ N	J = 1-0 F = 1-1	86338.767	1
	F = 2-1	86340.184	1
	F = 0-1	86342.274	1
H ¹² C ¹⁵ N	J = 1-0	86054.961	1
H ¹⁴ N ¹² C	J = 1-0	90663.543	1
H ¹⁴ N ¹³ C	J = 1-0	87090.900	1
¹² C ¹² CH	N = 1-0 F = 3/2,1-1/2,1	87284.156	1
	F = 3/2,2-1/2,1	87316.925	1
	F = 3/2,1-1/2,0	87328.624	1
	F = 1/2,1-1/2,1	87402.004	1
	F = 1/2,0-1/2,1	87407.165	1
	F = 1/2,1-1/2,0	87446.512	1
¹² C ¹³ CH	N = 1-0 F = 3/2,2-1/2,1	85228	3

(1) In the text, the atomic number of the main isotopes have been omitted.

(i.e. ¹²C³⁴S is referred to as C³⁴S)

(2) References: 1 = Lovas, 1986; 2 = Tiemann, 1976; 3 = this work.

previously reported estimates. They show that the silicon isotopic ratios in the envelope of IRC + 10216 are very close to the solar system and ISM values (e.g. Penzias, 1981).

3.2. The [³²S]/[³⁴S], [³²S]/[³³S], and [³⁴S]/[³³S] ratios

To our knowledge, the only measurement of a sulfur isotopic ratio in IRC + 10216 is that of Wannier and Linke (1978). From the line intensity ratio of the (3-2) transitions of C³²S and C³⁴S, observed with the MW0 5 m telescope, these authors derive an abundance ratio of 22. They take into account the IR excitation of the lines, but assume incorrectly that the main isotope line is optically thin. Furthermore, the C³⁴S line observed with this small antenna is so weak that it is barely detected, so that the uncertainty on its intensity is very large. That Wannier and Linke's C³²S/C³⁴S

ratio agrees with the solar system [³²S]/[³⁴S] elemental ratio is purely fortuitous.

Our data include the optically thin Si³²S (*J* = 5-4) line and the first detection of ³³S isotopes in IRC + 10216. We derive [³²S]/[³⁴S] and [³²S]/[³³S] from the SiS family to avoid optical depth effects. [³⁴S]/[³³S] can be estimated both from CS and SiS.

Derivation of [C³⁴S]/[C³³S] is not straightforward because of the quadrupole hyperfine structure of the ³³S nucleus. The L.T.E. hyperfine pattern of C³³S (*J* = 2-1) is shown in Fig. 7a, superimposed on the observed spectrum. The C³³S (*J* = 2-1) emission is dominated by the *F* = 7/2-5/2 and *F* = 5/2-3/2 components, the only *hf* components emerging from the noise on the spectrum of Fig. 1c. These components plus the weak *F* = 1/2-1/2 component contribute about 70% to the total *N* = 1-0 integrated intensity. The line integrated intensity in

Table 2

Transition	$\int A dv$ (K.km/s)	σ (K.km/s)	T_A (K)	σ (K)
CS (2-1)	198.3	6.0	6.76	0.26
CS (3-2)	205	20	7.41	0.75
¹³ CS (2-1)	5.41	0.18	0.175	0.008
¹³ CS (3-2)	9.58	0.75	0.282	0.031
C ³⁴ S (2-1)	13.93	0.34	0.415	0.022
C ³⁴ S (3-2)	20.6	1.6	0.553	0.062
C ³³ S (2-1) ⁽¹⁾	1.38	0.35	0.030	0.015
¹³ C ³⁴ S (3-2)	0.47	0.17	0.010	0.005
SiS (5-4)	66.5	1.4	2.463	0.077
SiS (8-7)	171	17	6.06	0.62
²⁹ SiS (5-4)	3.31	0.30	0.118	0.011
²⁹ SiS (8-7)	12.2	1.2	0.309	0.046
³⁰ SiS (5-4)	2.21	0.21	0.089	0.010
³⁰ SiS (8-7)	7.71	0.49	0.212	0.048
Si ³⁴ S (5-4)	3.07	0.33	0.090	0.018
Si ³⁴ S (8-7)	10.3	1.0	0.295	0.036
Si ³³ S (5-4)	0.63	0.13	0.022	0.014
Si ³³ S (8-7)	1.89	0.20	0.063	0.013
SiO	36.0	1.0	1.60	0.11
²⁹ SiO	3.09	0.26	0.130	0.012
³⁰ SiO	1.80	0.11	0.067	0.009
HCCCN	89.9	4.6	3.54	0.54
H ¹³ C ¹³ CCN	4.81	0.35	0.128	0.029
HC ¹³ CCN	4.75	0.75	0.119	0.030
HCC ¹³ CN	4.29	0.75	0.110	0.030
HCN	268.3	7.9	13.43	0.64
H ¹³ CN	162.2	8.3	7.46	0.52
HC ¹⁵ N	1.73	0.28	0.079	0.011
HNC	38.3	1.0	1.06	0.14
HN ¹³ C	0.93	0.16	0.020	0.007
CCH ⁽²⁾	88.4	4.4	2.29	0.29
C ¹³ CH ⁽³⁾	1.10	0.45		

(1) integrated intensity and center antenna temperature of the strongest components (see text).

(2) integrated intensity and center antenna temperature are the sum of that of the six CCH lines (see text).

(3) integrated intensity of the two strongest components (see text)

Table 2 refers only to these hyperfine components; the ratios in Table 3 refer to the total C³³S, $N=1-0$ emission.

The high J transitions of Si³³S have no resolvable hf structure (see Fig. 7b). The Si³²S/Si³³S isotopic ratio can then directly be derived from the integrated intensity ratios. The good agreement between the sulfur isotopic ratios in CS and SiS (see Table 3) strongly suggests that sulfur-bearing molecules are not affected by isotopic fractionation, so that the molecular isotopic ratios can be considered as reliable measurements of the elemental ratios. The average values of the sulfur isotopic ratios reported in Table 4 appear to be very close to the solar system and ISM isotopic ratios.

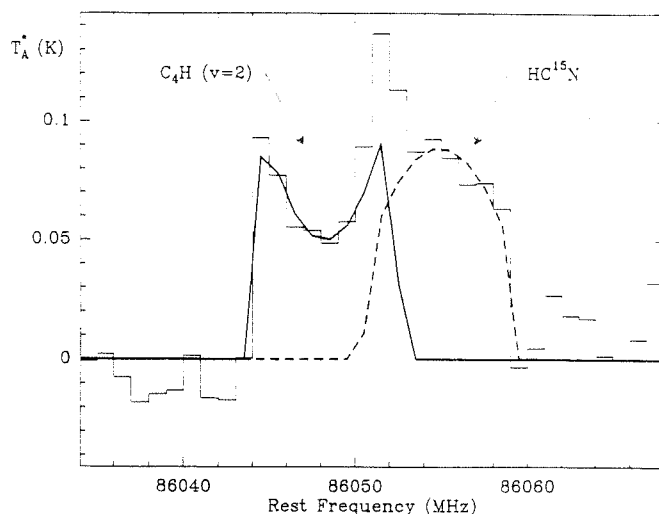


Fig. 6. An example of composite shell-type fit. The synthetic profile is a truncated parabola with sharp edges convolved with the spectral resolution of 1 MHz. The C₄H line presents a U-shape profile, indicative of optically thin resolved emission. In contrast, the round-topped HC¹⁵N profile corresponds to optically thin unresolved emission.

3.3. The [¹²C]/[¹³C] ratio

The [¹²C]/[¹³C] elemental ratio is an interesting probe of the nucleosynthetic and mixing processes, but its determination is difficult: when the ¹³C isotope line is reasonably strong, the ¹²C line is likely to be optically thick; conversely, when the main isotope line can be considered as optically thin, the rare isotope line is so weak that the chances of accidental blending with lines of similar strength become significant.

The first attempts to determine this ratio from millimeter observations used optically very thick lines of CO and HCN (Morris et al., 1971; Kwan and Hill, 1977). They relied on complicated modeling and had little reliability. IR observations of the vibration-rotation lines of ¹²CO and ¹³CO offered a slightly better insight and led to a value of ¹²CO/¹³CO \approx 20, uncertain by a factor 2 (Barnes et al., 1977). From their observations of the ¹³C isotopes of HC₃N, Olofsson et al. (1982) derived a lower limit of 20 to the [¹²C]/[¹³C] ratio. Finally, using the BTL 7 m dish, Wannier and Linke (1978) derived a ¹²CS/¹³CS $J=2-1$ line intensity ratio of 40 (+18, -10, 1 σ), which, as mentioned by the authors, must be considered as a lower limit to the ¹²CS/¹³CS abundance ratio, since the ¹²CS line is not optically thin.

In order to get a more reliable value of the [¹²C]/[¹³C] ratio in IRC + 10216, we have observed the ¹²C and ¹³C isotopes of five carbon-bearing molecules: HC₃N, CS, HNC, CCH, and SiCC.

The main isotope of the first two species presents optically thick lines and yields only lower limits to the isotopic ratio (see Table 3). It can however be noted that the lines of the ¹³C isotopes of HC₃N have the same intensity, which shows, as expected, that the ¹³C abundance in HC₃N is probably not affected by isotopic fractionation.

So far, the millimeter spectrum of the ¹³C species of CCH has not been observed in the laboratory. Only one submillimeter rotational transition has been marginally detected (Destombes, 1986), but the assignment of its components is very tentative. The center frequency of the $N=1-0$ rotational transition of the ¹³C isotopes can nevertheless be accurately derived from those of the

Table 3

Isotope Ratio	Molecules	Line area Ratio ⁽¹⁾	Temperature Ratio ⁽¹⁾
$[^{12}\text{C}]/[^{13}\text{C}]$	$^{12}\text{CS}/^{13}\text{CS}$ (2-1)	32.7 (+2.4, -2.3)	34.4 (+3.4, -3.1)
	$^{12}\text{CS}/^{13}\text{CS}$ (3-2)	19.0 (+4.0, -3.5)	23.4 (+6.2, -5.0)
	$\text{C}^{34}\text{S}/^{13}\text{C}^{34}\text{S}$ (3-2)	38 (+30, -14)	49 (+68, -23)
	$\text{HCCCN}/\text{H}^{13}\text{CCCN}$	17.6 (+2.5, -2.2)	26 (+13, -8.6)
	$\text{HCCCN}/\text{HC}^{13}\text{CCN}$	18.8 (+4.7, -3.4)	29 (+16, -9.6)
	$\text{HCCCN}/\text{HCC}^{13}\text{CN}$	21.0 (+5.7, -4.0)	32 (+19, -11)
	$\text{HNC}/\text{HN}^{13}\text{C}$	38 (+10, -7.0)	49 (+39, -19)
	$\text{CCH}/\text{C}^{13}\text{CH}$	33 (+25, -11)	
	$\text{HCN}/\text{H}^{13}\text{CN}$	1.57 (+0.14, -0.12)	1.71 (+0.23, -0.20)
$[^{28}\text{Si}]/[^{29}\text{Si}]$	$\text{SiS}/^{29}\text{SiS}$ (5-4)	19.4 (+2.5, -2.1)	20.1 (+2.9, -2.4)
	$\text{SiS}/^{29}\text{SiS}$ (8-7)	13.5 (+3.1, -2.5)	18.9 (+5.8, -4.3)
	$\text{SiO}/^{29}\text{SiO}$	11.4 (+1.5, -1.1)	12.0 (+2.2, -1.8)
	$\text{SiCC}/^{29}\text{SiCC}$	18.4 (+1.7, -1.4)	22.8 (+7.1, -3.9)
$[^{28}\text{Si}]/[^{30}\text{Si}]$	$\text{SiS}/^{30}\text{SiS}$ (5-4)	28.0 (+3.9, -3.2)	25.7 (+4.5, -3.6)
	$\text{SiS}/^{30}\text{SiS}$ (8-7)	20.6 (+3.8, -3.4)	26.6 (+12, -7.7)
	$\text{SiO}/^{30}\text{SiO}$	19.1 (+1.9, -1.7)	22.7 (+5.6, -4.3)
	$\text{SiCC}/^{30}\text{SiCC}$	29.0 (+2.4, -2.1)	31.9 (+7.6, -4.4)
$[^{29}\text{Si}]/[^{30}\text{Si}]$	$^{29}\text{SiS}/^{30}\text{SiS}$ (5-4)	1.45 (+0.31, -0.25)	1.28 (+0.31, -0.25)
	$^{29}\text{SiS}/^{30}\text{SiS}$ (8-7)	1.53 (+0.27, -0.24)	1.41 (+0.71, -0.45)
	$^{29}\text{SiO}/^{30}\text{SiO}$	1.68 (+0.27, -0.23)	1.89 (+0.51, -0.39)
	$^{29}\text{SiCC}/^{30}\text{SiCC}$	1.39 (+0.16, -0.13)	1.26 (+0.56, -0.32)
$[^{32}\text{S}]/[^{34}\text{S}]$	$\text{CS}/\text{C}^{34}\text{S}$ (2-1)	13.8 (+0.8, -0.7)	15.8 (+1.6, -1.4)
	$\text{CS}/\text{C}^{34}\text{S}$ (3-2)	9.6 (+1.9, -1.6)	13.0 (+3.2, -2.6)
	$\text{SiS}/\text{Si}^{34}\text{S}$ (5-4)	20.5 (+3.1, -2.5)	26.9 (+7.9, -5.3)
	$\text{SiS}/\text{Si}^{34}\text{S}$ (8-7)	15.7 (+3.6, -3.0)	19.4 (+5.2, -4.1)
$[^{32}\text{S}]/[^{33}\text{S}]$	$\text{CS}/\text{C}^{33}\text{S}$ (2-1) ⁽²⁾	85 (+19, -14)	133 (+65, -35)
	$\text{SiS}/\text{Si}^{33}\text{S}$ (5-4)	103 (+30, -20)	109 (+205, -46)
	$\text{SiS}/\text{Si}^{33}\text{S}$ (8-7)	88 (+21, -17)	94 (+37, -25)
$[^{34}\text{S}]/[^{33}\text{S}]$	$\text{C}^{34}\text{S}/\text{C}^{33}\text{S}$ (2-1) ⁽²⁾	6.1 (+1.3, -0.9)	8.4 (+4.2, -2.2)
	$\text{Si}^{34}\text{S}/\text{Si}^{33}\text{S}$ (5-4)	5.0 (+1.9, -1.2)	4.2 (+9.4, -2.1)
	$\text{Si}^{34}\text{S}/\text{Si}^{33}\text{S}$ (8-7)	5.6 (+1.3, -1.0)	4.8 (+1.9, -1.3)
$[^{34}\text{S}][^{12}\text{C}]/[^{32}\text{S}][^{13}\text{C}]$	$\text{C}^{34}\text{S}/^{13}\text{CS}$ (2-1)	2.37 (+0.15, -0.14)	2.18 (+0.25, -0.22)
	$\text{C}^{34}\text{S}/^{13}\text{CS}$ (3-2)	1.98 (+0.36, -0.31)	1.80 (+0.49, -0.39)

(1) Numbers in parenthesis are 1 σ errorbars.(2) A corrective factor has been applied to the line ratios to take into account the C^{33}S hyperfine structure (see text)

Table 4

Isotope Ratio	Average Value ⁽¹⁾	Terrestrial Ratio	Method
$[^{28}\text{Si}]/[^{29}\text{Si}]$	18.7 (+1.3, -1.0)	19.6	$^{28}\text{SiS}/^{29}\text{SiS}$, $^{28}\text{SiCC}/^{29}\text{SiCC}$
$[^{28}\text{Si}]/[^{30}\text{Si}]$	28.6 (+1.8, -1.5)	29.8	$^{28}\text{SiS}/^{30}\text{SiS}$, $^{28}\text{SiCC}/^{30}\text{SiCC}$
$[^{29}\text{Si}]/[^{30}\text{Si}]$	1.47 (+0.11, -0.09)	1.52	$^{29}\text{SiS}/^{30}\text{SiS}$, $^{29}\text{SiCC}/^{30}\text{SiCC}$, $^{29}\text{SiO}/^{30}\text{SiO}$
$[^{32}\text{S}]/[^{34}\text{S}]$	20.2 (+2.6, -2.1)	22.5	$\text{Si}^{32}\text{S}/\text{Si}^{34}\text{S}$
$[^{32}\text{S}]/[^{33}\text{S}]$	100 (+23, -16)	125	$\text{Si}^{32}\text{S}/\text{Si}^{33}\text{S}$
$[^{34}\text{S}]/[^{33}\text{S}]$	5.7 (+0.8, -0.6)	5.5	$\text{Si}^{34}\text{S}/\text{Si}^{33}\text{S}$, $\text{C}^{34}\text{S}/\text{C}^{33}\text{S}$
$[^{12}\text{C}]/[^{13}\text{C}]$	47 (+6, -5)	89	$\text{C}^{34}\text{S}/^{13}\text{CS}$
$[^{14}\text{N}]/[^{15}\text{N}]$	> 4400	277	$\text{H}^{13}\text{CN}/\text{HC}^{15}\text{N}$

(1) Numbers in parenthesis are 1 σ errorbars.

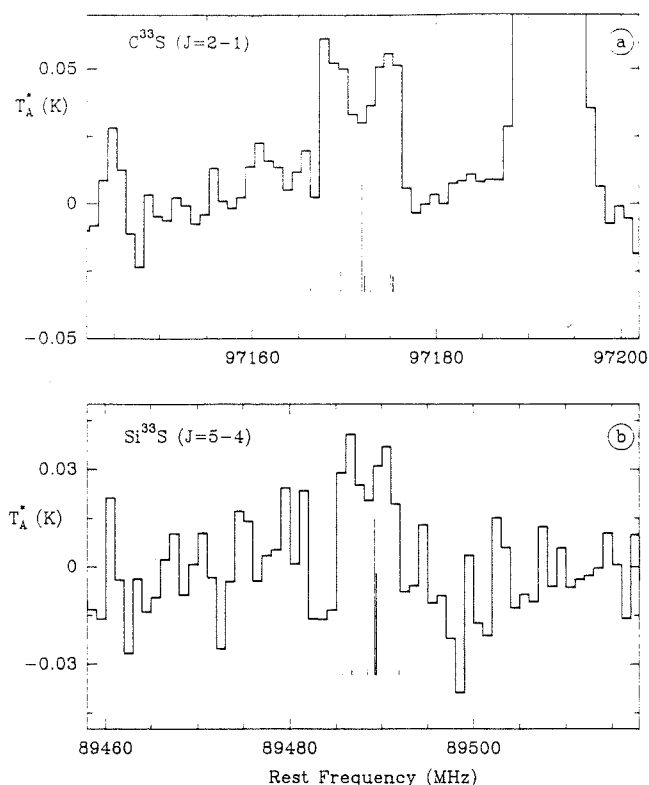


Fig. 7a and b. The frequencies and the relative L.T.E. intensities of the hyperfine components of the $C^{33}S$ ($J=2-1$) transition (a) and of the $Si^{33}S$ ($J=5-4$) transition (b) are represented by thin lines. The spectra are the same as in Fig. 1d and i

main and deuterated species. The fine structure splitting of the lines can also be obtained from that of the main isotope, as it should scale with the rotation constant B (see, e.g., Townes and Schawlow, 1975). On the other hand, the hyperfine splitting, which is dominated by the ^{13}C nucleus can only be roughly estimated from ESR measurements. Fortunately, the frequency of the strongest hyperfine component, the ($F, F_1 = 2.5/2 \rightarrow 1.5/2$) component, is relatively insensitive to the value of the hyperfine parameters. We calculate it to be 85228 ± 6 MHz, for $C^{13}CH$, and 84129 ± 10 MHz for ^{13}CCH ; the next strongest hf component, ($F, F_1 = 2.3/2 \rightarrow 1.1/2$), is predicted to lie only $\approx 3-5$ MHz below and must partly overlap.

According to these calculations, the two strongest hf components of $N=1-0$ $C^{13}CH$ fall within the broad spectral feature apparent on Fig. 4b. We tentatively assign this feature to $C^{13}CH$ (A broad line in SgrB2, with a central frequency of 85231 MHz, has already been assigned to this species by Guélin et al., 1982). Considering the high density of lines in our spectra (see for instance Fig. 1f), we cannot rule out that part of this weak feature comes from another molecule.

Assuming that the feature in Fig. 4b arises only from the two hf components mentioned above (they contribute to 25 and 16% respectively of the total $N=1-0$ transition strength), we can calculate the total $N=1-0$ velocity-integrated intensity (Table 2) and compare it with that observed for the main isotope (the six hyperfine components of the main isotope – see Fig. 4a – show U-shaped profiles and their relative intensities are equal to the expected LTE values; they are thus optically thin). This leads to

$C^{12}CH/C^{13}CH = 33$ (see Table 3). The actual abundance ratio could be larger if an unrelated species contributed to the feature assigned to $C^{13}CH$.

The HNC molecule is also a good candidate for the measurement of the $^{12}C/^{13}C$ isotopic ratio: the $J=1-0$ line of the main isotope is optically thin and its hyperfine splitting can be neglected (see Fig. 3d); moreover, the $HN^{13}C$ ($1-0$) line frequency is accurately known. We report here the first detection of this rare isotope in IRC + 10216. As in the case of $C^{13}CH$, the $HN^{13}C$ line is very weak and the chances of accidental blending with another line are not small. The HNC $HN^{13}C$ integrated intensity ratio given in Table 3 (38) could then only be a lower limit to the molecular abundance ratio.

Finally, four transitions of $Si^{13}CC$ have been recently detected in IRC + 10216 by Cernicharo et al. (1987). These lines are very weak (≤ 0.03 K) and their intensities poorly determined. The $^{12}C/^{13}C$ ratio we derive is $45 (+20, -12)$.

A way to avoid dealing with optically thick lines and very weak lines simultaneously consists in measuring double isotopic ratios. The most interesting ratio in this respect is the $[^{12}C]/[^{13}C]$ double ratio derived from the CS molecule. As we have seen, the $[^{32}S]/[^{34}S]$ ratio seems accurately determined from the SiS observations; the main uncertainty on the derivation of $[^{12}C]/[^{13}C]$ is then a hypothetical ^{13}C fractionation in CS.

When comparing the different values or limits derived for the $^{12}C/^{13}C$ ratio:

– $33 (+24, -11)$ and $38 (+10, -7)$ from CCH and HNC respectively;

– $47 (+6, -5)$ from the double $C^{34}S/^{13}CS$ isotopic ratio it appears that all determinations agree. This result is also in agreement with our detection of the very weak ($J=3-2$) transition of $^{13}C^{34}S$ (see Table 2): the $^{12}C^{34}S/^{13}C^{34}S$ ratio presents large uncertainties but leads to a $^{12}C/^{13}C$ ratio $\approx 40-50$ (see Table 3). We conclude that, although they are less accurate than the Si and S isotope ratios, our $^{12}C/^{13}C$ measurements rule out a large ^{13}C isotopic fractionation. This result agrees with the ionization models of IRC + 10216 (Glassgold et al., 1986), which predict that C^+ , the main ion thought to be responsible for ^{13}C fractionation, is abundant only in the external parts of the envelope and thus is unlikely to affect our high resolution on-source measurements.

In conclusion, the CS double isotopic ratio, which is probably free from optical depth and isotopic fractionation effects, provides the most accurate measurement of the $[^{12}C]/[^{13}C]$ isotopic ratio in the envelope of IRC + 10216. Its value indicates a ^{13}C enrichment by a factor of 2 with respect to the solar system abundance.

3.4. The $[^{14}N]/[^{15}N]$ ratio

$HC^{15}N$ was detected for the first time in IRC + 10216 by Wannier et al. (1981) who derived a double ratio $H^{13}CN/HC^{15}N$ of 77 ± 23 (the $H^{12}C^{14}N$ lines in IRC + 10216 are so saturated that the $HC^{14}N/HC^{15}N$ line intensity ratio is meaningless). The uncertainty on this value is large: observed with the Kitt Peak 11 m antenna, the $HC^{15}N$ line is very weak and hardly detected; furthermore, its width seen with the IRAM 30 m telescope is larger than that of $H^{13}CN$ and indicates a partial blend with another weak line (see Fig. 6); finally, the $H^{13}CN$ line is probably optically thick.

Owing to the gain in sensitivity provided by the IRAM 30 m antenna, the signal to noise ratio in the $HC^{15}N$ ($J=1-0$) spectrum is good enough to resolve the $HC^{15}N$ line from the partly overlapping line, using standard shell-type profiles (see

Fig. 6). We get a lower limit of 90 to the $\text{H}^{13}\text{CN}/\text{HC}^{15}\text{N}$ isotopic abundance ratio and, adopting the value of 47 derived above for the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic ratio, derive an elemental ratio $^{14}\text{N}/^{15}\text{N} > 4400$. Our limit indicates that ^{15}N is probably underabundant with respect to ^{14}N by a factor of at least 15.

4. Conclusions

Until recently, attempts to derive isotopic ratios in carbon-rich stellar envelopes had to face great difficulties: with the lack of sufficient spatial resolution and receiver sensitivity, observations of the rare isotopes were limited to the most abundant molecules, so that the main isotope lines were optically thick; analyses of the observational data had then to rely on complicated modeling or could only lead to limits to the isotopic ratios. Furthermore, the signal to noise ratios were not always sufficient to analyse the line profiles in terms of optical depth and some transitions were misinterpreted as optically thin because they appeared weak, leading to underestimates of the isotopic ratios.

With the increase in sensitivity brought by the IRAM 30 m telescope, it was possible to initiate a programme of measurements of isotopic ratios in stellar envelopes. The first candidate was of course IRC+10216 and we have made a redetermination of the carbon, nitrogen, sulfur and silicon isotopic ratios in this source.

The accurate profiles obtained for the strong lines of the main isotopes allow a good determination of the line shapes; those are useful indicators of the line opacity, and we have rejected from our analysis all the lines suspected to be optically thick. In contrast to previous determinations, we derive values, not just limits to the isotopic ratios. Furthermore, except in the case of nitrogen, we determine the isotopic ratios from several independent species and check that the values should not be affected by chemical fractionation. The results can be summed up as follows:

- Rare silicon and sulfur isotopes of SiCC, SiO, SiS, and CS previously not or hardly detected in IRC+10216, are observed with good signal-to-noise ratios; the silicon and sulfur elemental isotopic ratios are all accurately derived and are found consistent with those in the solar system.

- The best estimate of the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio in IRC+10216 comes from the double $^{12}\text{C}^{34}\text{S}/^{13}\text{C}^{32}\text{S}$ abundance ratio; it is a factor of 2 smaller than the terrestrial $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ elemental ratio; the factor of 2 agrees with the less accurate single ratios derived from the detection of the ^{13}C isotopes of CCH, HNC, SiCC, and C^{34}S .

- The very weak HC^{15}N ($J=1-0$) line yields a $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ ratio at least 15 times larger than the terrestrial ratio.

Many studies have been devoted to the determination of the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio in the circumstellar and interstellar gas. We briefly discuss how they compare with our results in IRC+10216.

Observations of CN and CO lines at optical and/or near IR wavelengths, are powerful methods to derive $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ in the atmosphere of red giants without too thick envelopes. They yield values ranging from 5 to 30 in O-rich and SC-type stars (see e.g. Wannier, 1985 and references herein). For the brightest stars, the major uncertainty on these measurements comes from line saturation and from the determination of the excitation temperature of the lines and is typically ≈ 5 (1σ).

In diffuse clouds, the determination of the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio relies mainly on optical observations of CH^+ : the lines' opacity is probably small and the species is not severely affected by chemical fractionation. Until recently however, the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio measurements have suffered from insufficient sensitivity. The latest work of Hawkins and Jura (1987) towards several diffuse clouds lead to

a $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio of 43, significantly lower than previous measurements ($\approx 60-70$, see e.g. Snell et al., 1977; Vanden Bout and Snell, 1980).

In the giant molecular clouds and in the local dust clouds, the measurements are based on the observation of rotational lines of various molecules in the mm and cm ranges. To minimize optical depth and chemical fractionation effects, the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio is preferentially derived from the double $\text{H}_2\text{C}^{18}\text{O}/\text{H}_2^{13}\text{CO}$ ratio: the dense cloud values are, with a rather large uncertainty, in agreement with the terrestrial value (≈ 90), at least in the galactic disk. Towards the galactic center, the determination of the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio is even more uncertain: most molecules lead to a $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio $\approx 20-30$, significantly smaller than the values (ranging from 45 to 80) derived from $\text{H}_2\text{C}^{18}\text{O}/\text{H}_2^{13}\text{CO}$ (see for instance Penzias, 1980; Langer et al., 1984).

From this brief summary of the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ measurements in various galactic objects, it appears that accurate determinations are rare; the major uncertainties come from optical depth and chemical fractionation effects. As we have shown, our measurement of the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio in IRC+10216 is probably free from both effects so that our determination is among the more accurate and reliable ones.

Our measurements of the isotopic ratios in the envelope of IRC+10216 seem consistent with current ideas on nucleosynthesis: the rare silicon isotopes, ^{29}Si and ^{30}Si , and the rare sulfur isotopes ^{34}S and ^{36}S are synthesized at very high temperatures, which are not reached in red giants such as IRC+10216 (see, e.g., Arnett, 1978). The sulfur and silicon isotopic ratios in IRC+10216 are then expected to have kept their original ISM values and to be close to the solar system ones.

^{13}C on the other hand, is mainly produced in the CNO cycles in red giants (see, e.g., Audouze, 1985). ^{15}N is believed to be produced by explosive burning in novae and possibly supernovae while quiet CNO burning efficiently destroys this isotope and leads to an enrichment in ^{14}N (ibidem). For the range of temperatures and densities which should prevail in the H-burning zone of a star like IRC+10216, the equilibrium $^{14}\text{N}/^{15}\text{N}$ isotopic ratio is very large and the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ ratio is of the order of 1-10 (For instance, according to Clayton, 1968, at $T \approx 2.5 \cdot 10^8$ K and $n \approx 10^{-2} \text{ g cm}^{-3}$, these equilibrium ratios are respectively $\approx 10^4$ and 3). If we assume that the initial ratios were the terrestrial ones, we can explain the values observed in the IRC+10216 envelope as the result of admixing of unprocessed gas with enriched matter: the fraction of this latter must be ≈ 0.5 according to the carbon isotopic ratio and > 0.2 according to the nitrogen isotopic ratio limit. Both ratios are then consistent with a very simple model of cold CNO cycle and admixing of the products in the envelope.

Acknowledgements. We would like to thank the IRAM Granada staff, particularly H. Hein and S. Navarro for their assistance during observations. It is also a pleasure to thank Dr. Glassgold for his comments and Dr. Vivekanand for a careful review of the manuscript.

References

- Arnett, W.D.: 1978, *Astron. Astrophys.* **219**, 1008
- Audouze, J.: 1985, in *Production and Distribution of C, N, O Elements*, Proceedings of the ESO Workshop, eds. I.J. Danziger, F. Matteucci, K. Kjar
- Barnes, T.G., Beer, R., Hinkle, K.H., Lambert, D.L.: 1977, *Astrophys. J. Letters* **162**, L15

- Blundell, R., Cernicharo, J., Guélin, M.: 1987 (in preparation)
- Cernicharo, J., Kahane, C., Gomez-Gonzales, J., Guélin, M.: 1986, *Astron. Astrophys.* **167**, L9
- Cernicharo et al.: 1987 (in preparation)
- Clayton, D.D.: 1968, *Principles of Stellar Evolution and Nucleosynthesis*, McGraw-Hill, New York
- Destombes, J.L.: 1986 (private communication)
- Dupree, A.K.: 1986, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* **24**, 377
- Glassgold, A.E., Lucas, R., Omont, A.: 1986, *Astron. Astrophys.* **157**, 35
- Guélin, M., Cernicharo, J., Linke, R.A.: 1982, *Astrophys. J.* **263**, L89
- Guélin, M., Cernicharo, J., Kahane, C., Gomez-Gonzales, J.: 1986, *Astron. Astrophys.* **157**, L17
- Guélin, M., Cernicharo, T., Navarro, S., Woodward, D.R., Gottlieb, C.A., Thaddeus, P.: 1987, *Astron. Astrophys.* **182**, L37
- Hawkins, I., Jura, M.: 1987, *Astrophys. J.* (in press)
- Johansson, L.E.B., Andersson, C., Ellder, J., Friberg, P., Hjalmarson, A., Hoglund, B., Irvine, W.M., Olofsson, H., Rydbeck, G.: 1984a, *Astron. Astrophys.* **130**, 227
- Johansson, L.E.B., Andersson, C., Ellder, J., Friberg, P., Hjalmarson, A., Hoglund, B., Irvine, W.M., Olofsson, H., Rydbeck, G.: 1984b, *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **60**, 135
- Kwan, J., Hill, F.: 1977, *Astrophys. J.* **215**, 781
- Langer, W.D., Graedel, T.E., Frérking, M.A., Armentrout P.B.: 1984, *Astrophys. J.* **277**, 581
- Lucas, R., Omont, A., Guilloteau, S., Nguyen, Q Rieu: 1986, *Astron. Astrophys.* **154**, L11
- Morris, M., Lucas, R., Omont, A.: 1985, *Astron. Astrophys.* **142**, 107
- Morris, M., Zuckerman, B., Palmer, P., Turner, B.E.: 1971, *Astrophys. J. Letters* **170**, L109
- Olofsson, H., Johansson, L.E.B., Hjalmarson, A., Nguyen-Q Rieu: 1982, *Astron. Astrophys.* **107**, 128
- Penzias, A.A.: 1980, in *Interstellar Molecules, IAU Symp.* **87**, ed. B.H. Andrew, Reidel, Dordrecht, p. 397
- Penzias, A.A.: 1981, *Astrophys. J.* **249**, 513
- Rank, D.M., Geballe, T.R., Wollman, E.R.: 1975, *Astrophys. J. Letters* **187**, L111
- Snell, R., Tull, R., Vanden Bout, P., Vogt, S.: 1977, in *CNO Isotopes in Astrophysics*, ed. J. Audouze, Reidel, Dordrecht
- Tiemann, E.: 1976, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **5**, 1147
- Townes, C.H., Schawlow, A.L.: 1975, *Microwave spectroscopy*, Dover, New York, p. 24
- Vanden Bout, P.A., Snell, R.L.: 1980, *Astrophys. J.* **236**, 460
- Wannier, P.G.: 1985, in *Production and Distribution of C, N, O Elements*, Proceedings of the ESO Workshop, eds. I.J. Danziger, F. Matteucci, K. Kjar
- Wannier, P.G., Linke, R.A.: 1978, *Astrophys. J.* **225**, 130
- Wannier, P.G., Linke, R.A., Penzias, A.A.: 1981, *Astrophys. J.* **247**, 522
- Wannier, P.G., Sahai, R.: 1987, *Astrophys. J.* **319**, 367
- Ziurys, L.M., Clemens, D.P., Saykally, R.J., Colvin, M., Schaefer, H.F.: 1984, *Astrophys. J.* **281**, 219
- Zuckerman, B.: 1980, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* **18**, 263

Note added in proof: Wannier and Sahai (1987) have just reported a redetermination of the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ isotopic ratio from CS isotopes. They derive a value (32 ± 4) which is smaller than ours.

III. LE RAPPORT $^{12}\text{C} / ^{13}\text{C}$ DANS QUATRE ÉTOILES DE TYPE J

Les étoiles de type J, c'est à dire anormalement riches en ^{13}C , sont intéressantes à plusieurs points de vue : (i) les mécanismes de nucléosynthèse et de mélange qui conduisent à des rapports isotopiques $[^{12}\text{C}] / [^{13}\text{C}]$ aussi faibles que ceux que l'on observe dans ces étoiles sont encore mal connus (voir par exemple Iben et Renzini, 1983; Harris *et al*, 1987); (ii) elles peuvent contribuer à enrichir notablement le milieu interstellaire en ^{13}C , pourvu que leur taux de perte de masse total soit suffisant (d'après Hawkins et Jura, 1987, le milieu interstellaire local présente une abondance relative $^{12}\text{C} / ^{13}\text{C}$ environ deux fois plus faible que l'abondance solaire); (iii) il semble d'autre part que la richesse en ^{13}C soit corrélée à la richesse en lithium des étoiles (Torres-Peimbert et Wallerstein, 1966), si bien que les étoiles de type J pourraient constituer une des sources de lithium galactique, dont l'origine est assez controversée (Scalo, 1976).

La mesure du rapport $^{12}\text{C} / ^{13}\text{C}$, par des observations infrarouges, (Lambert *et al*, 1986), a permis la détection de quatre étoiles de type J, mais ces observations sont limitées aux étoiles de pertes de masse relativement faibles, qui ne contribuent donc qu'assez peu à l'évolution de la composition isotopique galactique. En outre, ces déterminations de rapports isotopiques peuvent souffrir d'incertitudes importantes dues aux problèmes d'opacité des raies. Il nous a donc semblé intéressant de les vérifier et de les compléter, le cas échéant, par des observations radio.

A. Observations ^{12}CO et ^{13}CO (J=1-0)

Nous avons entrepris, en juillet 1987, un programme de recherche d'enveloppes de type J, grâce à l'observation des raies (J=1-0) de ^{12}CO et ^{13}CO , dans une trentaine d'enveloppes circumstellaires, menée avec le 30m de l'IRAM. L'échantillon d'enveloppes choisies comprenait :

(1) les étoiles proches et de faibles pertes de masse, observées en optique par Lambert *et al* (1986), dont quatre étoiles de type J, afin de comparer les rapports d'abondance $[^{12}\text{C}] / [^{13}\text{C}]$ déduits des observations optiques et radio.

(2) des enveloppes d'étoiles à forte perte de masse, inobservables en optique, dont il suffirait qu'un petit nombre soit de type J pour expliquer l'enrichissement galactique en ^{13}C .

(3) des enveloppes d'étoiles présentant une particularité (telle que fort flux à 12 μm , grande vitesse d'expansion) qui pourrait être liée à la richesse en ^{13}C .

Parmi les quelques 25 enveloppes observées, seules trois étoiles de type J (Y CVn, RY Dra et T Lyr), déjà connues comme telles, ont été identifiées. (Une quatrième, WZ Cas a été observée ultérieurement en CO (2-1), comme nous verrons plus loin). La discussion de ces observations fait l'objet de l'article qui suit.

Nous avons vu lors de l'étude des rapports isotopiques dans IRC+10216, que, si les raies sont optiquement minces, le rapport d'abondances $^{12}\text{CO} / ^{13}\text{CO}$ peut se calculer à partir des aires de raies, issues, ici, d'une source non résolue, par la formule

$$[^{12}\text{CO}] / [^{13}\text{CO}] = [\int T_A^* (^{12}\text{CO}) dv / \int T_A^* (^{13}\text{CO}) dv] (v_{13} / v_{12})^3 \quad (\text{IV.5})$$

(L'article qui suit mentionne une dépendance en v^4 , qui est inexacte, cependant la correction est très faible ($\sim 4\%$), comme il apparaît à la comparaison des rapports isotopiques indiqués dans l'article et dans la **Table IV.4**).

Pour déduire de nos observations le rapport d'abondances élémentaires $[^{12}\text{C}] / [^{13}\text{C}]$, il faut donc (i) que la relation (IV.5) puisse s'appliquer, c'est à dire que les raies soient optiquement minces, (ii) que les molécules aient la même extension spatiale et la même excitation, (iii) que les abondances moléculaires ne soient pas affectées par le fractionnement chimique.

Pour les trois étoiles de type J, les valeurs $[^{12}\text{CO}] / [^{13}\text{CO}]$ reportées dans la Table 1 de l'article varient entre 1.35 et 1.85 et sont environ deux fois plus faibles que les valeurs déduites des observations IR.

En raison de la résolution spectrale et des rapports signal / bruit trop faibles de nos observations, il n'est pas possible de se fonder sur la forme des profils de raies pour déterminer si les transitions sont optiquement minces ou optiquement épaisses. A partir d'un modèle de transfert de rayonnement dans les enveloppes, Knapp et Morris (1985) définissent un critère d'opacité, selon lequel la raie $^{12}\text{CO}(1-0)$ est optiquement épaisse si le facteur $[(dM/dt).f/(V.\Delta V)]$ est supérieur à $1.3 \cdot 10^{-10}$ (dM/dt est la perte de masse, exprimée en M_\odot /an, f l'abondance relative de ^{12}CO par rapport à H_2 , V la vitesse d'expansion du gaz de l'enveloppe et ΔV la vitesse turbulente dans l'enveloppe, toutes deux exprimées en km/s).

Pour les trois étoiles J que nous avons observées en ^{12}CO (1-0), on obtient, en utilisant les valeurs des taux de perte de masse fournis par Claussen *et al* (1987), les vitesses d'expansion déduites de nos observations, un rapport d'abondance $f = [\text{CO}] / [\text{H}_2]$ de $8 \cdot 10^{-4}$ et une largeur turbulente de 1 km/s, les résultats qui figurent dans la **Table IV.1**.

Selon ce critère, les raies ^{12}CO (1-0) (et donc a fortiori les raies ^{13}CO (1-0)) sont optiquement minces. Nous avons en outre vérifié (voir l'article ci-après), en modélisant l'émission des raies ^{12}CO et ^{13}CO (1-0), qu'aucun autre effet d'excitation ne semblait pouvoir biaiser le rapport d'aires de raies.

Table IV.1 Critère d'opacité des raies ^{12}CO (1-0)

Etoile	(dM/dt)	V	(dM/dt)f/(VΔV)	Conclusion
Y CVn	$1.1 \cdot 10^{-7}$	7.0	$1.2 \cdot 10^{-11}$	optiquement mince
RY Dra	$1.3 \cdot 10^{-7}$	13.0	$8.0 \cdot 10^{-12}$	optiquement mince
T Lyr	$1.1 \cdot 10^{-7}$	12.2	$7.0 \cdot 10^{-12}$	optiquement mince

Nous avons également discuté les effets possibles de la photodissociation sélective des deux molécules et conclu qu'ils étaient négligeables (en outre, s'ils ne l'étaient pas, le rapport des densités projetées des molécules surestimerait le rapport d'abondances $^{12}\text{CO} / ^{13}\text{CO}$, car l'isotope principal aurait une extension spatiale plus grande que l'isotope rare).

Enfin, compte-tenu de la température élevée que nous déterminons pour le gaz moléculaire de ces enveloppes ($T_K > 100$ K), le fractionnement chimique, qui augmenterait l'abondance de ^{13}CO par rapport à celle de ^{12}CO , est inopérant.

Nous concluons donc, dans l'article ci-après, que le rapport isotopique élémentaire $[^{12}\text{C}] / [^{13}\text{C}]$ à la surface des trois étoiles de type J observées en émission CO (1-0) pourrait atteindre une valeur de l'ordre de 2 et peut-être même inférieure.

Detection of ^{13}CO radio emission from ^{13}C -rich carbon stars

M. Jura¹, C. Kahane², and A. Omont^{1,2}

¹ Department of Astronomy, UCLA, Los Angeles, CA 90024, USA

² Observatoire de Grenoble, UJF, CERMO, B.P. 68, U.A. CNRS no. 708, F-38402 St. Martin d'Hères Cedex, France

Received October 21, 1987; accepted January 27, 1988

Summary. We have detected a high ratio (>0.5) of $^{13}\text{CO}/^{12}\text{CO}$ radio emission in the $J = 1 - 0$ rotational line from three mass-losing carbon stars which optical data indicate have high $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ratios. Since chemical fractionation, isotope-dependent photo-dissociation and opacity in the rotational and vibrational lines may not raise significantly the $^{13}\text{CO}/^{12}\text{CO}$ ratio above the actual $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ratio in these circumstellar envelopes, the relative abundance of ^{13}C in these stars might be even greater by perhaps a factor of two than previously believed. About 15% of all luminous carbon stars are ^{13}C -rich, and these stars may play a significant role in the enhancement in the $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ratio that has occurred during the past 4.6 billion years since the formation of the Sun.

In an Appendix, we discuss the circumstances where the kinetic temperature of the gas in a circumstellar outflow might fall below the 2.7 K of the microwave background.

Key words: stars: circumstellar matter – stars: carbon – stars: abundances – radio lines: molecular – nucleosynthesis.

1. Introduction

Most carbon stars in the solar neighborhood are asymptotic giant branch stars that are losing significant amounts ($>10^{-7} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$) of mass (Claussen et al., 1987). These stars are of considerable interest both in their own right (see Olofsson, 1985; Jura, 1986a) and because they are a source of processed material that is being injected into the interstellar medium contributing to the chemical evolution of the Galaxy.

Because they are losing mass, carbon stars have extensive circumstellar envelopes which can be detected in the infrared and radio. We are engaged in a long-term program to study these envelopes. One of our goals is to understand the origin of elements such as carbon and its isotopes and lithium which may be largely synthesized in the interiors of carbon stars (Scalo, 1976). As part of this program, we have obtained ^{13}CO and ^{12}CO $J = 1 - 0$ radio observations of a number of carbon stars, and some of our initial findings are sufficiently striking that we report them here.

Previously, most ^{13}CO observations of circumstellar envelopes around evolved stars have been directed toward object

losing large amounts of mass ($10^{-5} - 10^{-4} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$) with very substantial circumstellar shells such as IRC + 10216 or CRL 2688 (Knapp and Chang, 1985; Sopka et al., 1987; Wannier and Sahai, 1987). However, radio telescopes and receivers have improved to such a degree that it is now possible to study the nearby (closer than 1000 pc) stars that are losing much less mass ($\sim 10^{-7} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$). These stars with low mass loss rates do not have much circumstellar dust and therefore they have been studied optically. For many years, it has been recognized that some of the optically bright carbon stars are very rich in ^{13}C (denoted J-type; see, for example, Dominy, 1985), and the most recent and comprehensive study of these abundances has been performed by Lambert et al. (1986). Specifically, Lambert et al. found 4 stars with $^{13}\text{C}/^{12}\text{C} \sim 0.25$, an order of magnitude larger than the average of this ratio for the 30 stars in their study. However, optical measurements of the amount of enhancement of ^{13}C can vary substantially for a particular star (Climenthaga et al., 1977; Johnson et al., 1982; Lambert et al., 1986). Here, we show that the radio data give strong confirmation to the result of the optical studies: some carbon stars have very enhanced ratios of $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$. In Sect. 2 we describe our data.

In Sect. 3, we discuss the kinetic temperature in these circumstellar envelopes because this quantity must be known in order to understand the circumstellar molecular chemistry and the emergent radio emission. In Sect. 4, we present our interpretation of the data, and in Sect. 5, we list our conclusions. In Appendix B, we generalize our discussion of the temperature profile of the gas to determine the conditions where T may fall to very low values, even below the 2.7 K of the microwave background.

2. Observations

We used the 30m IRAM telescope at Pico Veleta, Spain to measure the $J = 1 - 0$ rotational lines of ^{13}CO and ^{12}CO on 29 June to 3 July, 1987. The telescope full half-power beamwidth is $21''$ at 115 GHz. Both lines were observed simultaneously, using a SIS receiver for the ^{13}CO line and a cooled Schottky receiver for the ^{12}CO line. The double sideband temperatures of the receivers were measured to be 150 K and 300 K, respectively. The backend consisted of one filterbank of 512 channels, each channel being 1 MHz wide. The filter bank was split into two halves: each half was centered on the ^{13}CO and ^{12}CO frequency, respectively. The corresponding velocity resolution is 2.6 km s^{-1} at 115 GHz. The antenna temperature scale was calibrated every

Send offprint requests to: M. Jura

20 minutes or so by successively observing a cold load, a room-temperature load and the sky. The atmospheric absorption was estimated with the help of an atmospheric model and was found to be almost the same in both sidebands. The weather was varied; we often had marginal observing conditions with clouds, fog and rain, but the data presented here were acquired during intervals of clear sky with relatively low humidity (atmospheric opacity at the zenith if 0.25–0.35 for ^{12}CO and 0.10–0.20 for ^{13}CO). Pointing was checked at least every hour, by beam switching on a continuum calibrator, and was found to be accurate within $3''$. The observations were made in a position-switched mode and the reference points were chosen to be offset by $10'$ in right ascension from the stellar position. In the case of S Sct ($b = -3.3$), the emission from the circumstellar envelope is polluted by narrow lines arising from interstellar clouds. To obtain the emission of the envelope alone, the four adjacent positions (offsets of $20''$ in right ascension or declination) were observed and their averaged spectra subtracted from that of the central position.

The temperatures reported in Table 1 and Figs. 1 to 3 and denoted T_A^* , are single sideband antenna temperatures above the earth's atmosphere. Only linear baselines have been subtracted from the spectra plotted in Figs. 1–3.

^{12}CO and ^{13}CO data for 11 stars are given in Table 1. The ($^{13}\text{CO}/^{12}\text{CO}$) ratio has been corrected for (i) the frequency dependence of the line strength, $(\nu_{12}/\nu_{13})^2$, and (ii) for the beam dilution factor assuming unresolved sources, another factor of $(\nu_{12}/\nu_{13})^2$. The line intensity, central velocity and width for each star are derived from a fit of the data by model profiles which are simply truncated parabolas. We find that three stars, Y CVn,

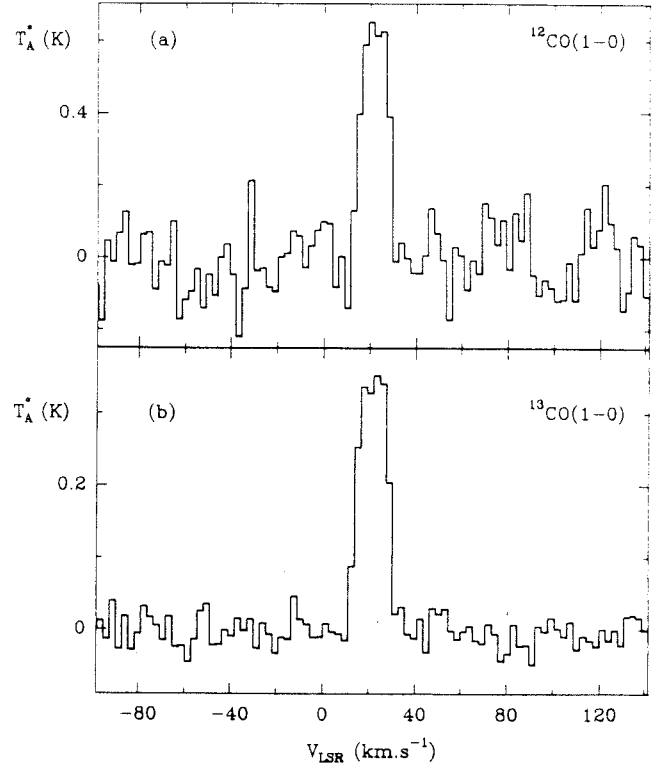


Fig. 1. a Spectrum of the $^{12}\text{CO}(J = 1 - 0)$ emission from Y CVn. b Spectrum of the $^{13}\text{CO}(J = 1 - 0)$ emission from Y CVn

Table 1. ($J = 1 - 0$) emission from carbon stars

Star	d pc	dM/dt $10^{-7} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$	$\int T_A^* dv$ ^{12}CO K km s $^{-1}$	$\int T_A^* dv$ ^{13}CO K km s $^{-1}$	v_{LSR} km s $^{-1}$	v_{EXP} km s $^{-1}$	$^{13}\text{CO}/^{12}\text{CO}^a$ radio	$^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ optical	Ref.
U Cam	480	3.0	23.1 (0.7)	<0.91	6.5 (0.4)	25.2	<0.047	0.010	1, 6
R Lep	430	3.2	26.3 (0.9)	<0.81	11.7 (0.2)	17.7	<0.037	0.016	2, 5
W Ori	350	1.3	5.2 (0.4)	<0.26	-1.4 (0.3)	10.9	<0.060	0.013	1, 5
Y Tau	490	2.2	6.8 (0.6)	<0.47	15.5 (0.8)	11.8	<0.083	0.017	1, 6
UU Aur	300	1.3	15.9 (0.6)	<0.45	7.5 (0.3)	11.2	<0.034	0.019	1, 6, 7
V Hya	340	9.6	50.7 (1.0)	1.3 (0.2)	-16.7 (0.3)	13.7	0.030	0.014	2, 4
Y CVn	290	1.1	8.3 (0.6)	5.2 (0.1)	21.7 (0.4)	7.0	0.74	0.29	1, 2, 3, 5
RY Dra	470	1.3	9.1 (0.8)	4.1 (0.1)	-4.0 (0.6)	13.0	0.54	0.28	1
T Lyr	510	1.1	1.7 (0.4)	1.0 (0.1)	7.9 (0.4)	12.2	~0.72	0.31	1
S Sct	520	2.1	1.0 (0.2)	<0.13	15.6 (0.8)	6.4	<0.14	0.023	1
V Cyg	580	19	63.9 (1.5)	4.1 (0.1)	14.0 (0.2)	14.0	0.077	?	2, 5, 6

^a This ratio has been corrected by the factor of $(\nu_{12}/\nu_{13})^4$ as described in the text

The distances and mass loss rates are taken from Claussen et al. (1987) while the values of $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ are taken from Lambert et al. (1986). The radio data are the results of our observations. For stars with only upper limits to the ^{13}CO radio emission, we report $2\sigma_{\text{exp}}$ where σ is the rms noise in the ^{13}CO spectrum. The numbers in parenthesis are 1σ error bars. The errors on the expansion velocity are the same as on the LSR central velocity. Both velocities are derived from the ^{12}CO spectrum fit, except in the case of T Lyr, where these values are derived from the ^{13}CO line. For the ^{12}CO line in T Lyr, the velocity and the width of the fitted profile have been fixed to that of the ^{13}CO line

References: (1) Olofsson, Eriksson and Gustafsson (1987); (2) Knapp and Morris (1985); (3) Wannier and Sahai (1986); (4) Zuckerman and Dyck (1986b); (5) Zuckerman and Dyck (1986a); (6) Zuckerman, Dyck and Claussen (1986); (7) Knapp (1986)

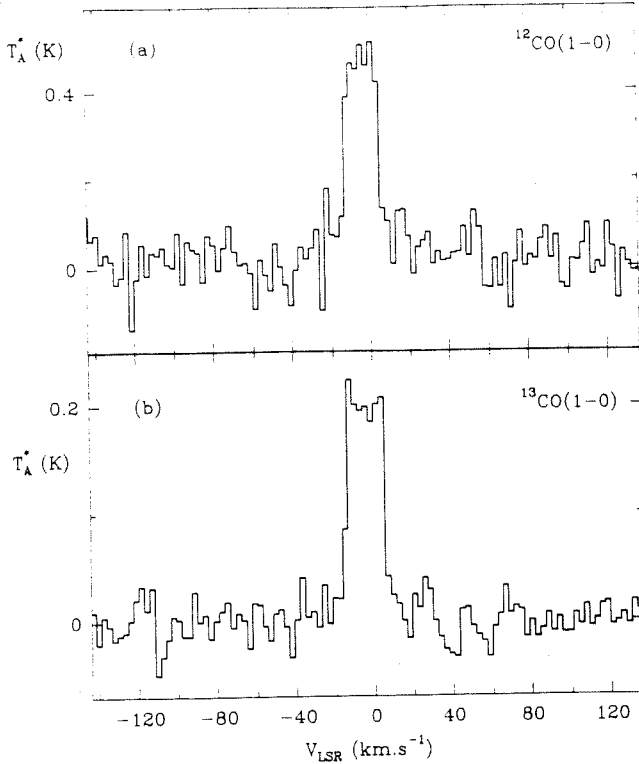


Fig. 2. a Same as Fig. 1a for RY Dra. b Same as Fig. 1b for RY Dra

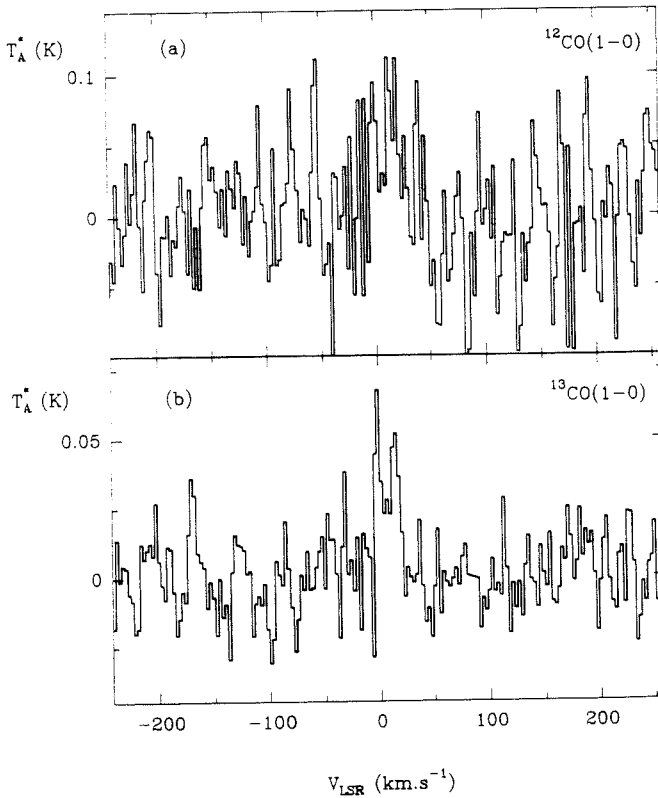


Fig. 3. a Same as Fig. 1a for T Lyr. b Same as Fig. 1b for T Lyr

Table 2. Comparison of our data with previous observations of ^{12}CO scaled to the IRAM 30 m telescope

Star	$\int T_B dv$ K Km s $^{-1}$ This paper	$\int T_B dv$ K Km s $^{-1}$
U Cam	33	11 (2); 32 (4)
R Lep	37.5	46 (1)
W Ori	7.4	8.3 (2)
Y Tau	9.7	14 (2); 16 (4)
UU Aur	22.5	18 (2); 20 (5)
V Hya	72	99 (1); 99 (3)
Y CVn	12.0	9.9 (2); 13 (1)
RY Dra	13.1	5.6 (2)
S Sct	1.4	< 8.6 (2)
V Cyg	105	119 (1); 129 (4)

In this Table the integrated intensities refer to the brightness temperature T_B , that is, the antenna temperature divided by the ratio of the main to the forward beam efficiency (0.70 for the 30 m telescope). No beam dilution factor has been applied to the 30 m telescope integrated intensities but the values measured at other telescopes have been multiplied by $(30/D)^2$ where D is the telescope diameter (in m)

References: (1) Knapp and Morris (1985); (2) Olofsson, Eriksson and Gustafsson (1987); (3) Zuckerman and Dyck (1986b); (4) Zuckerman, Dyck and Claussen (1986); (5) Knapp (1986)

RY Dra and T Lyr are particularly strong ^{13}CO sources; for T Lyr, the detection of the ^{12}CO line is only tentative. The spectra for these three stars are displayed in Figs. 1–3. Our data show relatively good agreement with previous CO radio observations; detailed comparisons are given in Table 3 where we list our values of T_B , the brightness temperature of the CO emission.

3. Gas kinetic temperature

The radial variation of the gas kinetic temperature, T , previously has been computed for stars with substantial mass loss rates (Goldreich and Scoville, 1976; Kwan and Hill, 1977; Kwan and Linke, 1982; Tielens, 1983). Here, because it is essential to understand the chemistry and excitation conditions in the observed circumstellar envelopes, we compute the temperature profile for stars losing relatively little mass. We may write for the temperature as a function of radius that:

$$dT/dr = (2 - 2\gamma)(T/r) - (\gamma - 1)(dq_{\text{CO}}/dt)(k\nu n)^{-1} + (\gamma - 1)(dq_{\text{dust}}/dt)(k\nu n)^{-1} \quad (1)$$

where n and v are the density and outflow velocity, respectively, while k is Boltzmann's constant and γ is the ratio of specific heats. In Eq. (1), the first term on the right hand side describes the adiabatic cooling, the second term, containing dq_{CO}/dt , represents the cooling per unit volume by CO emission that results from collisional excitation of this molecule while the third term

on the right hand side, containing dq_{dust}/dt , represents the heating per unit volume that results from supersonic streaming of the circumstellar dust grains through the gas. If the CO is in the low density, optically thin limit, we may write for $T > 100$ K that (McKee et al., 1982):

$$dq_{\text{CO}}/dt = 2.5 \cdot 10^{-27} T_3^5 n^2 f_{\text{CO}} \quad (2a)$$

In expression (2a), T_3 is the gas temperature in units of 1000 K and f_{CO} is the fractional abundance of CO defined such that $f_{\text{CO}} = 1$ for $n(\text{CO})/n(\text{H}) = 3.7 \cdot 10^{-4}$ where $n(\text{H})$ is the density of hydrogen nuclei, not hydrogen molecules. Equation (2a) only applies to regions where collisions dominate the excitation of the CO rotational levels; in the circumstellar envelopes with low mass loss rates there is considerable excitation by infrared pumping through the vibrational transitions (see, for example Morris, 1980). In this case, Eq. (2a), if anything, overestimates the gas cooling, since the pumping by a "hot" infrared radiation field may lead to a net heating of the gas rather than cooling. Detailed calculations are required.

We expect that the kinetic energy transferred from H_2 into internal excitation of CO gives the cooling and when the density is not too large, then:

$$dq_{\text{CO}}/dt = \langle \sigma v \rangle k T n(\text{H}_2) n(\text{CO}) \quad (2b)$$

The cooling rates in Eqs. (2a) and (2b) at 1000 K imply that at this temperature, $\langle \sigma v \rangle = 2.5 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ in agreement with expectations (see McKee et al., 1982). According to Hollenbach and McKee (1979), the cooling at 1000 K is usually dominated by collisional excitation of CO, therefore, other sources of cooling are not so important as that given by Eq. (2).

We may write for the heating rate resulting from dust-streaming that:

$$dq_{\text{dust}}/dt = (n_{\text{grain}} \sigma_{\text{grain}} v_d)^{1/2} \rho v_d^2 = \Gamma_0 n^2 \quad (3a)$$

In expression (3a), v_d is the grain streaming velocity through the gas driven by radiation pressure from the central star, ρ is the mass density of the gas, and n_{grain} and σ_{grain} are the grain density and cross section, respectively. We define Γ_0 implicitly in Eq. (3a), since ρ and n_{grain} are proportional to n . Therefore:

$$\Gamma_0 = (n_{\text{grain}} \sigma_{\text{grain}} / n) \mu v_d^3 / 2 \quad (3b)$$

In Eq. (3b), μ is the mean molecular weight of the gas. Because the dust to gas ratios in the circumstellar envelopes around carbon stars are, within the uncertainties, similar to the values in the interstellar medium (Jura, 1986b), we may write (see Spitzer, 1978, Eq. 7-23) when the gas is primarily molecular that:

$$n_{\text{grain}} \sigma_{\text{grain}} / n = 2.0 \cdot 10^{-21} \text{ cm}^2 \quad (4)$$

For comparison, Kwan and Hill (1977) and Kwan and Linke (1982) implicitly use a numerical value of $2.5 \cdot 10^{-21}$ in their equivalent of Eq. (4).

Following Kwan and Linke (1982), we can write for the streaming velocity that:

$$v_d = (v Q L / [c dM/dt])^{1/2} \quad (5)$$

In expression (5), L is the luminosity of the star, Q the ratio, averaged over frequency, of the radiation-momentum transfer cross section to the geometric cross section of the grains, c is the speed of light and dM/dt is the mass loss rate. The heating

rate is sensitive to Q which depends upon the grain size and in general is not well known. In Appendix A, we derive the heating rate for a plausible distribution of grain sizes.

It is straightforward to understand why we might expect high temperatures in stars with relatively low mass loss rates. According to the equation of continuity, we may write for the circumstellar density, ρ , that:

$$\rho = (dM/dt) / (4\pi r^2 v) \quad (6)$$

The outflow velocity is not a strong function of dM/dt (see, for example, Olofsson, 1985). Therefore, from Eq. (6), in stars that are losing small amounts of mass, the density in the circumstellar envelope is lower than in stars losing large amounts of mass. Since the densities are lower, the grain streaming velocity is considerably higher because there is relatively less drag resistance. Typically, the grain streaming velocity in a star losing a large amount of mass is 2 km s^{-1} (Sopka et al., 1985); for stars losing small amounts of mass the streaming velocity may be an order of magnitude larger (see, for example, Papoular and Pegourie, 1986). Since the heating rate varies as the streaming velocity cubed, we expect the temperatures in the circumstellar envelopes around stars losing small amounts of mass to be substantially greater than around stars losing large amounts of mass.

If we consider the outer circumstellar envelope where internal excitation of H_2 is negligible so that $\gamma = \frac{5}{3}$, and if we neglect radiative cooling, we can solve Eq. (1) exactly to find:

$$T = K_0 r^{-4/3} + r^{-1} [\Gamma_0 dM/dt / (2\pi k \mu v^2)] \quad (7a)$$

In Eq. (7a), K_0 is determined by the inner boundary conditions. At large r , the second term on the right hand side of (7a) must dominate. Therefore, it is possible to compute the gas temperature simply as a function of the parameters of the mass loss. At large r , the asymptotic value of T is:

$$T = r^{-1} [\sigma_{\text{grain}} n_{\text{grain}} / n] (Q L / c)^{3/2} (4\pi k)^{-1} (v dM/dt)^{-1/2} \quad (7b)$$

We can now verify our results by comparing with detailed numerical results. In Fig. 4 we show our solution to Eq. (1) compared to that of Kwan and Hill (1977) for the same parameters that they use ($Q = 0.013$, Eq. [4], $dM/dt = 2 \cdot 10^{-5} M_\odot \text{ yr}^{-1}$, $v = 16 \text{ km s}^{-1}$) except that we use Eq. (2a) for the radiative cooling term instead of a very detailed calculation for the photons that escape. Also, we extrapolate Eq. (2a) to lower temperatures than the region for which it is most accurate because, as can be seen from Eq. (2b), such an approximation is physically plausible. We see in Fig. 4 that our simplified version of the cooling does not lead to any gross departures from the more detailed calculations for the gas temperature.

Because we have confidence in our simplified version of the cooling, we can solve Eq. (1) for mass loss rates relevant to the stars that are discussed in this paper. For simplicity, we assume $\gamma = \frac{5}{3}$ even though this is too high and overestimates the amount of adiabatic cooling in the region where $T \sim 1000$ K. In Fig. 5 we display the temperature profile for a star with $dM/dt = 2 \cdot 10^{-7} M_\odot \text{ yr}^{-1}$. We assume the heating rate given by Eq. (A11) given in Appendix A, an outflow velocity of 10 km s^{-1} and an initial condition of $T = 4000$ K at $r = 3 \cdot 10^{15} \text{ cm}$ from the star. The temperature profile is quite insensitive to this inner boundary condition because the heating and cooling rates are much more rapid than the dynamic time scale so that the gas

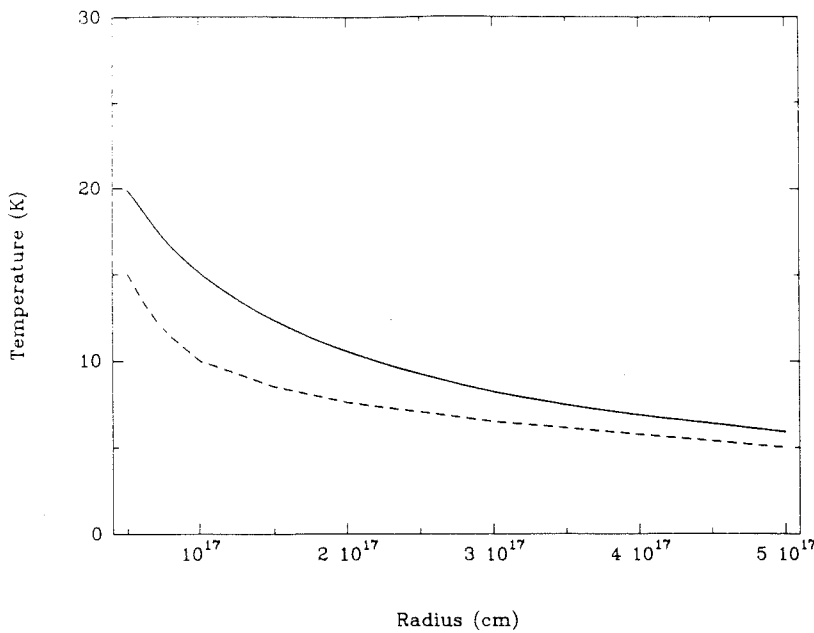


Fig. 4. Plot of our predicted kinetic temperature (solid line) for IRC + 10216 vs. very detailed results from Kwan and Hill (1977) given by the dashed line. We assume Eq. (4), $L = 2.1 \cdot 10^4 L_\odot$, $v = 16 \text{ km s}^{-1}$, $dM/dt = 2 \cdot 10^{-5} M_\odot \text{ yr}^{-1}$ and, in this figure, $Q = 0.013$. The radiative cooling is given by Eq. (2). The agreement between our simplified calculation and that by Kwan and Hill is satisfactory

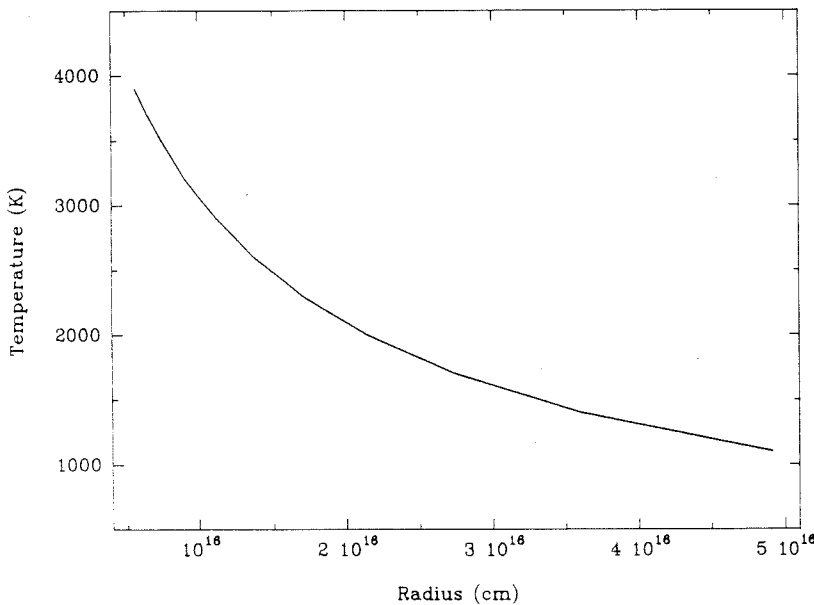


Fig. 5. Calculation for the temperature profile in the circumstellar envelope for a star with $dM/dt = 2 \cdot 10^{-7} M_\odot \text{ yr}^{-1}$, the heating rate given by Eq. (A11) and the other parameters given in the text

quickly reaches a thermal balance in the outflow. We see that $T > 1000 \text{ K}$ for $r < 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}$ from the star, the region where we expect most of the CO to be located in the circumstellar envelope. Unless we have either very dramatically overestimated the heating or underestimated the cooling, we expect thermal temperatures $\gg 100 \text{ K}$ in the CO-emitting portions of the circumstellar envelopes around stars losing small amounts of mass.

Our result that the temperature may be in excess of 1000 K in the circumstellar envelopes around stars with low mass loss rates is surprising. While the exact temperature does not affect the chemical fractionation if $T > 100 \text{ K}$ and therefore is not too important for this paper, the high temperatures that we infer could be quite significant in the circumstellar chemistry, the grain formation and evolution, and the molecular excitation. We will consider the consequences of these predicted high

temperatures and perform more detailed estimates of the gas temperature profiles in future work.

4. Discussion

We now address the question of the interpretation of our data. First, how accurately does the observed $^{13}\text{CO}/^{12}\text{CO}$ ratio reflect the true $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ratio in the outflow for the stars with $dM/dt \sim 10^{-7} M_\odot \text{ yr}^{-1}$?

4.1. Chemical fractionation

In the outer circumstellar envelopes of mass-losing stars, chemical reactions can be important (Glassgold et al., 1986; Omont,

1986; Glassgold et al., 1987). If the gas temperature falls below about 30 K, ^{13}CO may be enhanced over ^{12}CO if much of the gas-phase carbon is not being carried as CO (Langer et al., 1984). Above, we have argued that we expect the gas temperatures to be greater than 100 K; therefore, chemical fractionation should not be important.

4.2. Isotope-dependent photodissociation

The photochemistry of CO in circumstellar envelopes has been discussed extensively (Mamon et al., 1988). Here, for stars losing small amounts of mass, it is straightforward to show that dust shielding is not important. Self-shielding of the CO is significant (Morris and Jura, 1983; Mamon et al., 1988; Kahane et al., 1988). Therefore, because of its greater abundance, ^{12}CO is expected to be more extended than ^{13}CO , and it is difficult to see how isotope-dependent photodissociation can lead to an enhancement of the ratio $^{13}\text{CO}/^{12}\text{CO}$. Self-shielding leads to a typical extent for the CO around a star losing $10^{-7} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$ of $2 \cdot 10^{16} \text{ cm}$ (Mamon et al., 1988). Nevertheless, even if ^{13}CO is photodissociated closer to the star than ^{12}CO , the time scale is sufficiently short that chemical reactions can lead to the reformation of ^{13}CO from the exchange reaction of $^{13}\text{C}^+$ and ^{12}CO (see Mamon et al., 1988). Consequently, the ^{13}CO and ^{12}CO molecules may have the same spatial extent.

4.3. Radiative transfer effects in the CO lines

We are interested in using the intensity ratio $I(^{13}\text{CO})/I(^{12}\text{CO})$ to estimate $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ and therefore $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$. Aside from the corrections for beam dilution and the radiative transition rate, described above, which together amount to $(v_{12}/v_{13})^4$, we wish to consider whether the observed intensity ratio $I(^{13}\text{CO})/I(^{12}\text{CO})$ is different from $^{13}\text{CO}/^{12}\text{CO}$ due to differential excitation or radiative transfer effects. One possibility is that the infrared pumping lines become optically thicker for the ^{12}CO lines than for the ^{13}CO thus leading to less excitation of the ^{12}CO . However, for the mass loss rates of interest here, according to the calculations described by Knapp and Morris (1985), the antenna temperature of the $J = 1 - 0$ rotational line of CO is roughly linearly proportional to the amount of CO that is being lost. Therefore, we do not expect the ratio of the intensities of the radio emission from ^{12}CO and ^{13}CO to be significantly reduced by opacity effects.

There is some possibility that the underlying star emits ^{12}CO and ^{13}CO pumping photons at different rates. However, because the intensity of the CO radio lines depends only weakly upon the intensity of the pumping radiation field (Knapp and Morris, 1985), and because both the ^{12}CO and ^{13}CO lines are likely to be very optically thick in the photosphere of these carbon stars and therefore have roughly the same emergent intensity, we do not expect much of a difference in the rate of radiative excitation between the two isotopes.

To investigate further the possible effects of radiative transfer on the relative intensities of the CO emission lines, Morris (1987) has computed some models for us similar to those described by Morris (1980) and employed by Knapp and Morris (1985). The results are displayed in Table 3. We consider a model for a star at 350 pc from the Sun with an outflow velocity of 10 km s^{-1} and a turbulent velocity in the outflow of 0.6 km s^{-1} . We assume that ^{13}CO has 0.25 the abundance of ^{12}CO to be consistent with the

Table 3. Models for CO radio emission

dM/dt 10^{-7} $M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$	$[\text{CO}]/[\text{H}_2]$ 10^{-4}	r_c 10^{16} cm	$T_A^*(1-0)$ K	$T_A^*(2-1)$ K
1	2	2	0.013	0.17
1	8	2	0.090	0.83
3	2	2	0.041	0.52
3	8	2	0.23	2.2
3	2	4	0.13	0.91
3	8	4	0.67	3.1

The computed values of T_A^* are for line center in the IRAM 30 m telescope. The line profiles are predicted to be flat to within about 10° .

optical data for these stars. Because CO is self-shielding and because the radial extent of the molecule, r_c , depends upon the square root of the CO outflow rate from the star (Morris and Jura, 1983), we compute models for $r_c = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}$ and $r_c = 4 \cdot 10^{16} \text{ cm}$. The results in Table 3 show that, for abundances reduced from $8 \cdot 10^{-4}$ to $2 \cdot 10^{-4}$, the emergent intensity of the CO is always reduced by more than a factor of 4. These two different CO loss rates might actually refer to the loss of ^{12}CO and ^{13}CO , respectively. The implication is that for mass loss rates of both 10^{-7} and $3 \cdot 10^{-7} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$, the antenna temperature of the CO $J = 1 - 0$ radio emission decreases by more than a factor of 4 when $[\text{CO}]/[\text{H}_2]$ is reduced from $8 \cdot 10^{-4}$ to $2 \cdot 10^{-4}$. Increasing the spatial extent of the CO from $2 \cdot 10^{16} \text{ cm}$ to $4 \cdot 10^{16} \text{ cm}$ also significantly increases the CO antenna temperature, and as noted above, if anything, we expect ^{12}CO to be more extended than ^{13}CO . We conclude that the ratio of the spectral line intensities, $I(^{13}\text{CO})/I(^{12}\text{CO})$, is not likely to be enhanced over the intrinsic value of $^{13}\text{CO}/^{12}\text{CO}$ by excitation effects.

In summary, we have considered a number of effects which might lead to an increase of the ratio of the radio emission of $^{13}\text{CO}/^{12}\text{CO}$ over the intrinsic $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$. On theoretical grounds, we have been unable to identify any important process. Therefore, it is at least possible that the true $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ratio of Y CVn, RY Dra and T Lyr is greater than 0.5. Observations of other circumstellar molecules will be very important in determining a definitive value of $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$. Toward Y CVn, Izumiura et al. (1987) report strong H^{13}CN maser emission, and it will be important to disentangle the maser and thermal contributions to the line profile to infer the intrinsic value of $\text{H}^{13}\text{CN}/\text{H}^{12}\text{CN}$. In any case, the processing of CNO can lead to $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ratios as high as 0.40 (Dearborn et al., 1976), and it is important to establish as accurately as possible the amount of ^{13}C enhancement in these carbon stars.

4.4. Stellar-evolutionary considerations

In Table 1, we report results for three stars which are clearly ^{13}C -rich defined such that $^{13}\text{C}/^{12}\text{C} > 0.3$; WZ Cas is known to be ^{13}C -rich as well (Lambert et al., 1986). These four stars are all within 600 pc of the Sun; there are a total of 28 luminous carbon stars in the northern sky ($\delta > -32^\circ$) out to this distance (Claussen et al., 1987). Because Lambert et al. (1986) measured $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ for 25 of these stars while Sopka et al. (1987) derive $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ for an additional 2 of these stars, IRC + 10216 and

V Cyg, there is only one star out of this 28, S Cep, for which the carbon isotope ratio is not accurately known to within a factor of two. Although we have only a small sample, it seems that about 15% of all the luminous carbon stars (4 out of 28) are ^{13}C -rich.

It is now established that the $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ratio in the local Milky Way has increased by about a factor of 2 since the formation of the sun about 4.6 billion years ago (Hawkins and Jura, 1987). The ^{13}C -rich stars may be important contributors to this enhancement since these stars are all losing appreciable amounts of mass. However, the bulk of material ejected from carbon stars into the interstellar medium is produced in those relatively few objects with very high mass loss rates ($> 10^{-5} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$, see Knapp and Morris, 1985; Claussen et al., 1987). As yet, no carbon star losing a large amount of mass is known to be ^{13}C -rich (see Sopka et al., 1987), and therefore the contribution of ^{13}C -rich carbon stars to the interstellar ^{13}C is not yet well understood.

5. Conclusions

We have obtained the following results:

1. Three mass-losing J -type carbon stars in the solar neighborhood show $J = 1 - 0$ radio emission ratios of $^{13}\text{CO}/^{12}\text{CO} > 0.5$.

2. About 15% of all luminous carbon stars losing "small" ($\sim 10^{-7} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$) amounts of mass are ^{13}C -rich, but at least as of now, none has been identified among the stars with high mass loss rates. If there is a similar proportion of stars losing large amounts of mass ($\sim 10^{-5} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$) which are ^{13}C -rich, such objects should be quite important for producing the observed increase of $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ in the local Milky Way during the past 4.6 billion years.

3. The kinetic temperatures everywhere in the CO-emitting portions of circumstellar envelopes of these stars losing $\sim 10^{-7} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$ are probably $\gg 100 \text{ K}$.

4. On theoretical grounds, we cannot clearly identify any process which should lead to an appreciable increase of $^{13}\text{CO}/^{12}\text{CO}$ over $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$. For YCVn, T Lyr and RY Dra, it may be that $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ is as large as 0.5. With further radio observations and modelling, it may be possible to determine more precisely the $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$ ratios in the circumstellar envelopes around these stars.

Acknowledgements. Mark Morris has made very helpful suggestions. M.J.'s work has been partly supported by NASA. This research has also been partly funded by a co-operative NSF-CNRS program.

Appendix A

Here, we evaluate the heating rate for a plausible mixture of grain sizes. In fact, we have very little information about the size distribution of circumstellar grains. For convenience and because there is no evidence to the contrary, we assume that circumstellar grains are similar to interstellar grains. In this case, if the grains have radius, a , we may write for the distribution function, $n(a)$, that (see Mathis et al., 1977):

$$n(a) da = n_0 a^{-3.5} da \quad (\text{A1})$$

We assume a minimum and maximum grain radius of a_{\min} and a_{\max} , respectively. We may determine n_0 from the inferred dust to gas ratio, Σ_{dg} . In particular, if the grain material has density,

ρ_d , then:

$$\int (n_0 a^{-3.5}) (4\pi a^3 \rho_d / 3) da = \mu n \Sigma_{dg} \quad (\text{A2})$$

In Eq. (A2), n is the density of hydrogen molecules with mean molecular weight, μ . With $a_{\max} \gg a_{\min}$, Eqs. (A1) and (A2) give:

$$n_0/n = 3 \Sigma_{dg} \mu / (8\pi \rho_d [a_{\max}]^1 \cdot 2) \quad (\text{A3})$$

If the grains are relatively small compared to the wavelength of most of the emission from the star so that scattering can be neglected, we may write (see Spitzer, 1978) for Q , defined in Eq. (5), that:

$$Q = 2\pi a Q_0 / \lambda \quad (\text{A4})$$

If χ is the opacity of the grain material ($\text{cm}^2 \text{ gm}^{-1}$), then:

$$\chi_\lambda = (\pi a^2) (2\pi a Q_0 / \lambda) (4\pi a^3 \rho_d / 3)^{-1} \quad (\text{A5})$$

Equation (A5) can be re-written to give:

$$Q_0 = 2\chi_\lambda \lambda \rho_d / (3\pi) \quad (\text{A6})$$

Around carbon stars, the grains opacity varies approximately as λ^{-1} (Jura, 1986b; Le Bertre, 1987) so we may write:

$$\chi_\lambda = \chi_0 \lambda_0 / \lambda \quad (\text{A7})$$

From Eqs. (A6) and (A7), we then have:

$$Q_0 = 2\chi_0 \lambda_0 \rho_d / (3\pi) \quad (\text{A8})$$

With the above results, we can now derive the heating rate. We write that:

$$dq_{\text{dust}}/dt = \int n(a) \pi a^2 (\mu n) (v_d(a)^3 / 2) da \quad (\text{A9})$$

Using the above relations, Eq. (5), and Γ_0 defined in Eq. (3), we find:

$$\Gamma_0 = (12)^{-1/2} \rho_d^{1/2} (\chi_0 \lambda_0 v L / c \lambda_e [dM/dt])^{3/2} \mu^2 \Sigma_{dg} a_{\max}^{1/2} \quad (\text{A10})$$

In Eq. (A10), λ_e is the effective wavelength of the emission from the photosphere which, for simplicity, we assume to be concentrated at a single frequency. The other quantities in Eq. (A10) are also accessible to observations.

With $\rho_d = 2.5 \text{ g cm}^{-3}$ for carbon grains, $\chi_0 = 150 \text{ cm}^2 \text{ gm}^{-1}$ at $60 \mu\text{m}$ (see Jura 1986b), $v = 10 \text{ km s}^{-1}$, $L = 10^4 L_{\odot}$, $\lambda_e = 1.5 \mu\text{m}$ (see Claussen et al., 1987), $dM/dt = 2 \cdot 10^{-7} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$, $\Sigma_{dg} = 4.5 \cdot 10^{-3}$ (Jura 1986b) and $a_{\max} = 0.1 \mu\text{m}$, we have:

$$\Gamma_0 = 3.4 \cdot 10^{-26} \text{ erg cm}^3 \text{ s}^{-1} \quad (\text{A11})$$

Because carbon stars typically display some polarization of their optical light that results from the scattering by circumstellar grains, we know that there must be some particles with radii $> 0.1 \mu\text{m}$ (Dyck et al., 1971; Daniel, 1982). Therefore, it is reasonable to take $a_{\max} = 0.1 \mu\text{m}$, close to the size proposed by Martin and Rogers (1987) for the grains around IRC + 10216. As can be seen from Eq. (A10), Γ_0 varies as $(dM/dt)^{-3/2}$ and thus Γ_0 is much larger for stars with low mass loss rates than the stars such as IRC + 10216 that have been considered previously.

Appendix B

As can be seen in the calculations for IRC + 10216 by Kwan and Hill (1977), it is possible that the temperature in a circumstellar envelope falls below the 2.7 K (Meyer and Jura, 1985) of the

microwave background. It would be of considerable interest to observe circumstellar molecules in absorption against the microwave background, and here we discuss this possibility.

Very low temperatures occur in circumstellar envelopes when adiabatic cooling is more important than any heating process. The asymptotic expression at large radii for the gas kinetic temperature given by Eq. (7), if anything, overestimates the gas temperature because of the neglect of radiative cooling. Therefore, we can use this expression to place a conservative limit on the gas temperature in a circumstellar envelope.

In a straightforward extrapolation of Eq. (7b), we would expect the temperature to fall below 2.7 K for those circumstellar envelopes with large numbers of grains but low values of Q , low luminosities, high mass outflow rates and high outflow velocities. These conditions are very similar to those necessary for the condensation of solid ice onto grains in circumstellar outflows (Jura and Morris, 1985). Therefore, stars with known ice-band absorption features in their spectra, such as the prototype, OH 231.8 + 4.2, are good candidates for observing this phenomenon. Using parameters for OH 231.8 + 4.2 similar to those given in Jura and Morris (1985), such that $Q = 0.01$, $L = 4 \cdot 10^3 L_\odot$, $dM/dt = 10^{-4} M_\odot \text{ yr}^{-1}$, $v = 20 \text{ km s}^{-1}$, and Eq. (4), we find:

$$T = 1.2 \cdot 10^{17/4} r \quad (\text{B1})$$

At $r = 5 \cdot 10^{16} \text{ cm}$ from the star, corresponding to 2''6 for a distance of 1300 pc (see Morris et al., 1982), we predict a gas temperature of 2.4 K which, of course, is smaller than 2.7 K. However, a major uncertainty in this analysis is Q . We have very little idea about the size of the grains in this object except that some of them must be large because there is a reflection nebulosity observed around the star. Since the grain temperature is sensitive to Q , it is quite uncertain whether the gas kinetic temperature falls below that of the microwave background.

In order to calculate the gas temperature accurately, it is important to establish whether there are other sources of heating besides the supersonic grain streaming. The most obvious candidates are those processes which heat interstellar clouds (see, for example, Jura, 1978). If we assume a heating rate given by $\Gamma_1 n$, we can rewrite Eq. (1) in the very outer envelope as:

$$dT/dr = -\frac{4}{3} T/r + \frac{2}{3} \Gamma_1 / (vk) \quad (\text{B2})$$

The solution at large r to Eq. (B2) is:

$$T = [\frac{2}{3} \Gamma_1 / (vk)] r \quad (\text{B3})$$

If we consider only heating by cosmic rays with an ionization rate of 10^{-17} s^{-1} (see Spitzer, 1978) and 15 eV per ionization (Glassgold and Langer, 1973), then $\Gamma_1 = 2.4 \cdot 10^{-28} \text{ erg s}^{-1}$. This gives (for $v = 16 \text{ km s}^{-1}$):

$$T = 3.1 \cdot 10^{-19} r \quad (\text{B4})$$

Therefore, cosmic rays, by themselves, cannot heat the circumstellar envelope to a temperature greater than the microwave background for $r < 10^{19} \text{ cm}$, a distance much too large to be of interest.

One source of external heating that can be important for raising the cloud temperature is the photo-effect of grains where it is possible that Γ_1 is as large as $10^{-25} \text{ erg s}^{-1}$ (see Jura, 1978). However, the photo-effect of grains can only be important in regions where the ultraviolet can penetrate. This region of penetration can be measured by the spatial distribution of the OH

masers which exist only in regions where H_2O flowing out from the star is photodissociated by ambient interstellar ultraviolet radiation (see, for example, Huggins and Glassgold, 1982). In the case of OH 231.8 + 4.2, the angular radius of the OH masers is about 4'' (Morris, et al., 1982), a distance considerably larger than the region ($\sim 2''5$) where we think the gas temperature falls below 2.7 K. Therefore, at least for this particular star, it is quite possible that the gas kinetic temperature in the region $\sim 10^{17} \text{ cm}$ from the star is below that of the microwave background.

References

- Claussen, M.J., Kleinmann, S.G., Joyce, R.R., Jura, M.: 1987, *Astrophys. J. Suppl.* **65**, 385
- Climenhaga, J.L., Harris, B.L., Holts, J.T., Smolinski, J.: 1977, *Astrophys. J.* **215**, 836
- Daniel, J.Y.: 1982, *Astron. Astrophys.* **111**, 58
- Dearborn, D.S.P., Eggleton, P.P., Schramm, D.N.: 1976, *Astrophys. J.* **203**, 455
- Dominy, J.F.: 1985, *Publ. Astron. Soc. Pacific* **97**, 1104
- Dyck, H.M., Forrest, W.J., Gillett, F.C., Stein, W.A., Gehr, R.D., Woolf, N.J., Shawl, S.J.: 1971, *Astrophys. J.* **165**, 57
- Glassgold, A.E., Langer, W.D.: 1973, *Astrophys. J.* **186**, 859
- Glassgold, A.E., Lucas, R., Omont, A.: 1986, *Astron. Astrophys.* **157**, 35
- Glassgold, A.E., Mamon, G., Omont, A., Lucas, R.: 1987, *Astron. Astrophys.* **180**, 183
- Goldreich, P., Scoville, N.: 1976, *Astrophys. J.* **205**, 144
- Hawkins, I., Jura, M.: 1987, *Astrophys. J.* **317**, 926
- Hollenbach, D.J., McKee, C.F.: 1979, *Astrophys. J. Suppl.* **41**, 555
- Huggins, P.J., and Glassgold, A.E.: 1982, *Astron. J.* **87**, 1828
- Izumiura, H., Ukita, N., Kawabe, R., Kaifu, N., Tsuji, T., Unno, W., Koyama, K.: 1987, *Astrophys. J. Letters* **323**, L81
- Johnson, H.E., O'Brien, G.T., Climenhaga, J.L.: 1982, *Astrophys. J.* **254**, 175
- Jura, M.: 1978, in *Protostars and Planets*, ed. T. Gehrels, University of Arizona: Tucson, p. 165
- Jura, M.: 1986a, *Irish Astron. J.* **17**, 322
- Jura, M.: 1986b, *Astrophys. J.* **303**, 327
- Jura, M., Morris, M.: 1985, *Astrophys. J.* **292**, 487
- Kahane, C., Maizels, C., Jura, M.: 1988, *Astrophys. J. Letters* **328**, L25
- Knapp, G.R.: 1986, *Astrophys. J.* **311**, 731
- Knapp, G.R., Chang, K.M.: 1985, *Astrophys. J.* **293**, 281
- Knapp, G.R., Morris, M.: 1985, *Astrophys. J.* **292**, 640
- Kwan, J., Hill, F.: 1977, *Astrophys. J.* **215**, 781
- Kwan, J., Linke, R.A.: 1982, *Astrophys. J.* **254**, 587
- Lambert, D.L., Gustafsson, B., Eriksson, K., Hinkle, K.H.: 1986, *Astrophys. J. Suppl.* **62**, 373
- Langer, W.D., Graedel, T.E., Frerking, M.A., Armentrout, P.B.: 1984, *Astrophys. J.* **277**, 581
- Le Bertre, T.: 1987, *Astron. Astrophys.* **176**, 107
- McKee, C.F., Storey, J.W.V., Watson, D.M., Green, S.: 1982, *Astrophys. J.* **259**, 647
- Mamon, G.A., Glassgold, A.E., Huggins, P.J.: 1988, *Astrophys. J.* (in press)
- Martin, P.G., Rogers, C.: 1987, *Astrophys. J.* **322**, 374
- Mathis, J.S., Rimpl, W., Nordsieck, K.H.: 1977, *Astrophys. J.* **217**, 425
- Meyer, D.M., Jura, M.: 1985, *Astrophys. J.* **297**, 119
- Morris, M.: 1980, *Astrophys. J.* **236**, 823

- Morris, M., Bowers, P.F., Turner, B.E.: 1982, *Astrophys. J.* **259**, 625
- Morris, M., Jura, M.: 1983, *Astrophys. J.* **264**, 546
- Olofsson, H.: 1985, in *Workshop on Submillimeter Astronomy*, ed. P.A. Shaver and K. Kjar, Garching: ESO, p. 535
- Olofsson, H., Eriksson, K., Gustafsson, B.: 1987, *Astron. Astrophys.* **183**, L13
- Omont, A.: 1986, in *Astrochemistry, IAU Symp. No. 120*, eds. M.S. Vardya and S.P. Tarafdar, Dordrecht: Reidel, p. 357
- Papoular, R., Pegourie, B.: 1986, *Astron. and Astrophys.* **156**, 199
- Scalo, J.M.: 1976, *Astrophys. J.* **206**, 795
- Sopka, R.J., Hildebrand, R., Jaffe, D.T., Gatley, I., Roellig, T., Werner, M., Jura, M., Zuckerman, B.: 1985, *Astrophys. J.* **294**, 242
- Sopka, R.J., Olofsson, H., Johansson, L.E.B., Rieu, Nguyen-Quang, Zuckerman, B.: 1988, *Astron. Astrophys.* (in press)
- Spitzer, L.: 1978, in *Physical Processes in the Interstellar Medium*, J. Wiley: New York
- Tielens, A.G.G.M.: 1983, *Astrophys. J.* **271**, 702
- Wannier, P.G., Sahai, R.: 1986, *Astrophys. J.* **311**, 335
- Wannier, P.G., Sahai, R.: 1987, *Astrophys. J.* **319**, 367
- Zuckerman, B., Dyck, H.M.: 1986a, *Astrophys. J.* **304**, 394
- Zuckerman, B., Dyck, H.M.: 1986b, *Astrophys. J.* **311**, 345
- Zuckerman, B., Dyck, H.M., Claussen, M.J.: 1986, *Astrophys. J.* **304**, 401

B. Autres observations d'isotopes ^{12}C et ^{13}C

Afin de vérifier que le rapport isotopique déduit des raies ^{12}CO et ^{13}CO ($J=1-0$) n'était effectivement biaisé ni par des effets d'excitation, ni par le fractionnement chimique, nous avons décidé d'observer une autre transition des mêmes molécules ainsi qu'une transition d'une espèce carbonée beaucoup moins abondante que CO dans les trois étoiles de type J que nous avons observées en CO ($1-0$), ainsi que dans la quatrième étoile de type J détectée par Lambert *et al* (1986) (que nous avons manquée lors de la recherche précédente en raison d'une erreur de coordonnées !).

La seule autre transition de CO accessible aux observations millimétriques est bien sûr la transition ($J=2-1$); sa détection, au moins dans les trois étoiles déjà observées en émission ($1-0$), était assurée car, grâce à la taille réduite du lobe de l'antenne, l'intensité des raies, dans ces enveloppes non résolues spatialement, augmente considérablement lorsque l'on passe des transitions ($J=1-0$) aux transitions ($2-1$), qui sont encore, quoiqu'issues d'un niveau rotationnel plus élevé, aisément excitées. En ce qui concerne le choix d'une autre espèce carbonée, nous avons écarté HCN, susceptible d'être abondante et de présenter des transitions optiquement épaisses (dont l'interprétation est en outre compliquée par la structure hyperfine due à l'atome d'azote) et qui, surtout, peut dans certains cas manifester une émission de type maser (Izumiura *et al*, (1987), ont observé des émissions maser dans la transition $J=1-0$ de l'état vibrationnel fondamental de H^{12}CN et de H^{13}CN , en direction de l'enveloppe Y CVn précisément). L'émission de CS ($2-1$) s'est finalement avérée suffisamment forte, au moins dans Y CVn et RY Dra, pour permettre une troisième estimation du rapport isotopique dans ces deux étoiles.

1. Les observations

Les observations de ^{12}CO et ^{13}CO ont été effectuées en mars 1988, avec le télescope de 30m de l'IRAM au Pico Veleta, par Alain Castets et Alain Omont, que je remercie ici vivement. Comme pour les transitions ($J=1-0$) à 3mm, nous avons pu observer simultanément les transitions ($J=2-1$) des deux isotopes, en utilisant deux récepteurs SIS, réglés en simple bande. Les observations de ^{12}CS et ^{13}CS ont, elles, été effectuées en septembre 1988, également avec le 30m de l'IRAM. Contrairement à ce qui était possible lors de nos observations précédentes, nous n'avons malheureusement pas pu observer simultanément les isotopes ^{12}C et ^{13}C , un seul récepteur étant disponible dans chaque

gamme de fréquence. L'utilisation simultanée de deux récepteurs SIS, l'un à 2mm, l'autre à 1mm, nous a cependant permis d'observer simultanément $^{12}\text{CS}(2-1)$ et $^{12}\text{CS}(5-4)$ ou $^{13}\text{CS}(2-1)$ et $^{13}\text{CS}(5-4)$. A la fréquence de $^{12}\text{CS}(5-4)$, le réglage simple bande du récepteur n'est pas possible, si bien que les observations ont été faites en mode double bande et le rapport des gains des bandes signal et image a été calibré en utilisant un filtre Fabry-Pérot.

Les températures, T_{SB} , des récepteurs, réglés en simple bande, ainsi que les caractéristiques du télescope à 1, 2 et 3 mm (lobe à mi-puissance, HPBW et rendement en lobe, η) figurent dans la **Table IV.2**. Nous y avons également indiqué les températures de système, T_{sys} et les épaisseurs optiques au zénith τ , typiques de ces deux sessions d'observation. Les températures d'antenne T_A^* ont été calibrées toutes les vingt minutes environ, en observant successivement une charge froide, une charge à la température ambiante et le ciel.

Table IV.2 Paramètres observationnels

DATE	RAIE	FREQUENCE	T_{SB}	HPBW	η	T_{sys}	τ
mars 88	$^{12}\text{CO}(2-1)$	230 GHz	230 K	12"	0.45	900	0.1
	$^{13}\text{CO}(2-1)$	220 GHz	200 K	12.5"	0.45	800	0.08
sept 89	$^{12}\text{CS}(2-1)$	98 GHz	180 K	24"	0.60	600	0.1
	$^{13}\text{CS}(2-1)$	92 GHz	180 K	26"	0.60	600	0.1
	$^{12}\text{CS}(5-4)$	245 GHz	250 K ⁽¹⁾	11"	0.44	3500	0.5
	$^{13}\text{CS}(5-4)$	231 GHz	230 K	12"	0.45	3500	0.6

(1) Température de récepteur double bande

Dans les deux cas, nous avons utilisé comme récepteur spectral ("backend") une banque de filtres de 512 canaux de 1 MHz de large, que nous avons partagée en deux moitiés centrées respectivement sur les fréquences de ^{12}CO et de ^{13}CO (ou, dans le deuxième cas, sur les fréquences des transitions (5-4) et (2-1) de ^{12}CS ou ^{13}CS). La résolution en vitesse fournie par les canaux de 1MHz est d'environ 3.0 km/s à 98 GHz, et 1.3 km/s à 230 GHz.

Les observations ont été effectuées selon la procédure dite de permutation de position, le point de référence étant choisi à 10 minutes d'arc en ascension droite de la position de l'étoile (aucune des quatre enveloppes étudiées n'est étendue ni contaminée par de l'émission interstellaire si bien que la position précise du point de référence importe peu).

Le pointage a été vérifié toutes les heures, en observant des sources continuum (planètes, quasars) et s'est avéré correct à 3 secondes d'arc près. En outre, afin de vérifier l'exactitude du pointage, et surtout des positions des enveloppes, nous avons effectué des observations "en croix" de chaque étoile, les décalages par rapport à la position de référence étant de $\pm 6''$ en ascension droite ou en élévation lors de la session de mars 1988 et de $\pm 10''$ en ascension droite ou en élévation lors de celle de septembre 1988 (cette précaution était particulièrement importante lors de cette dernière session d'observations, car nous n'observions plus simultanément les deux isotopes et des décalages de position entre les observations auraient faussé les comparaisons d'intensité des raies des deux isotopes).

La calibration des raies (et en particulier la calibration relative des raies des isotopes ^{12}C et ^{13}C) a été contrôlée en effectuant, lors de chaque session, une observation des raies dans l'enveloppe IRC+10216.

2. Les résultats

Les raies de ^{12}CO et de $^{13}\text{CO}(2-1)$ ont été détectées dans les quatre enveloppes (Y CVn, RY Dra, T Lyr et WZ Cas). Les raies de ^{12}CS et $^{13}\text{CS}(2-1)$ l'ont été dans les deux premières, alors que les raies (5-4) des mêmes molécules n'ont pu être détectées dans aucune enveloppe, l'épaisseur optique de l'atmosphère à 1mm étant trop élevée dans les conditions d'observations médiocres à haute fréquence que nous avons eu en septembre 1988.

Toutes les données (y compris les données $\text{CO}(1-0)$ reportées dans l'article) ont été rassemblées dans la **Table IV.3**. Les aires de raies, températures d'antenne au centre des raies, vitesses centrales et vitesses d'expansion des enveloppes ont été obtenues en modélisant les profils observés par des paraboles tronquées, à courbure positive ou négative, convoluées à la résolution en vitesse des canaux de 1MHz de large. Lorsque les raies étaient très bruyantes, la largeur et la vitesse centrale des profils modèles ont été fixées à des valeurs fournies par des raies mieux détectées. Les nombres entre parenthèses sont les incertitudes à 1 sigma, données par la modélisation des profils (celles sur la vitesse d'expansion sont semblables aux incertitudes sur la vitesse centrale, V_{LSR} , des raies). Les spectres sont représentés dans les **Figures IV.1 à IV.4** (seules des lignes de base de degré 1 ont été soustraites aux spectres).

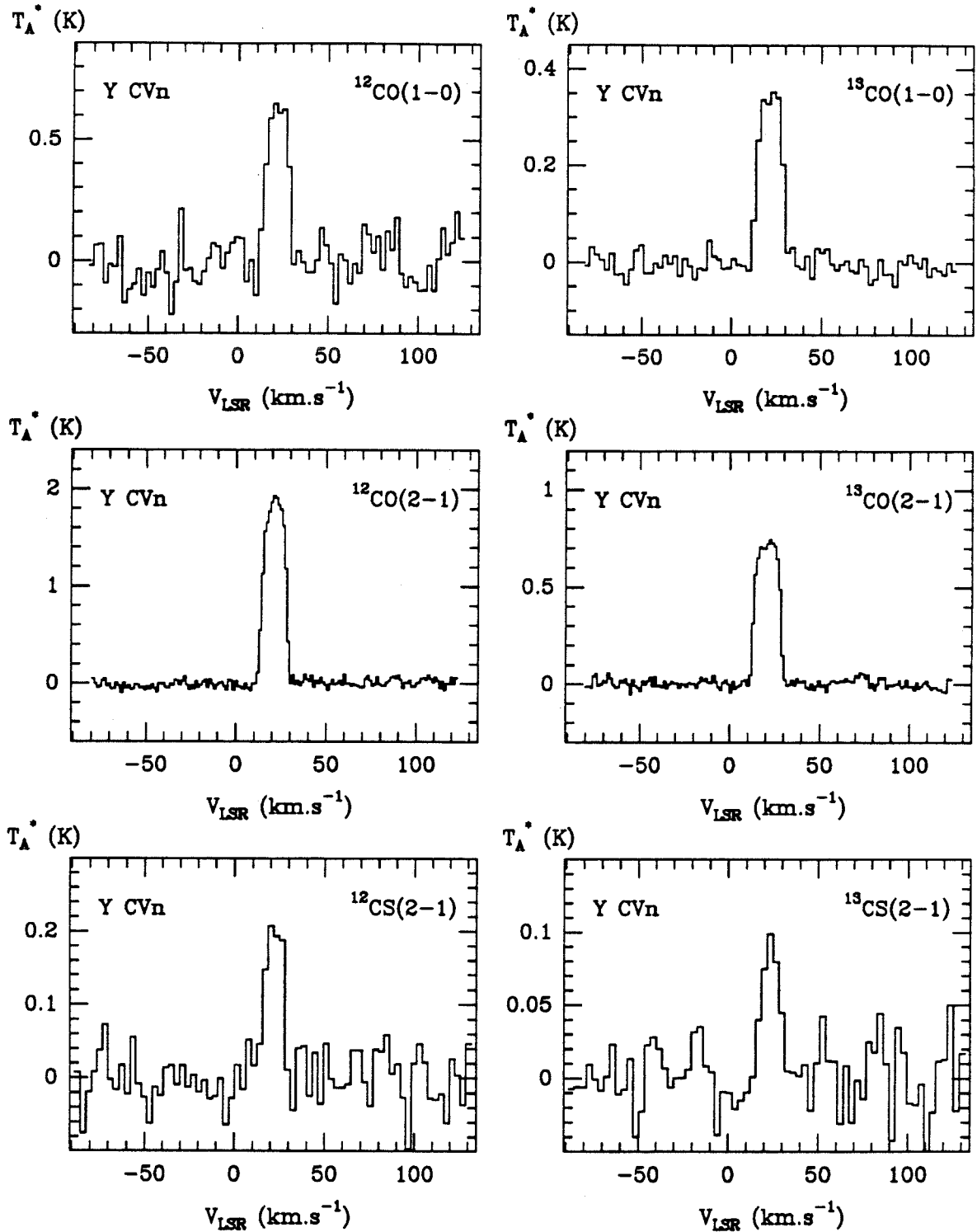


Figure IV.1 : Transitions ($J=1-0$) et ($J=2-1$) des isotopes ^{12}C et ^{13}C de CO et CS observés avec l'antenne de 30m de diamètre de l'IRAM dans l'enveloppe circumstellaire Y CVn. La résolution spectrale est de 1MHz, ce qui correspond à 2.60 km/s pour $^{12}\text{CO}(1-0)$, 1.30 km/s pour $^{12}\text{CO}(2-1)$, 3.06 km/s pour $^{12}\text{CS}(2-1)$, 2.72 km/s pour $^{13}\text{CO}(1-0)$, 1.36 km/s pour $^{13}\text{CO}(2-1)$ et 3.24 km/s pour $^{13}\text{CS}(2-1)$. Les coordonnées du point d'observation sont $\alpha = 12^{\text{h}} 42^{\text{m}} 47.0^{\text{s}}$ et $\delta = 45^{\circ} 42' 48''$.

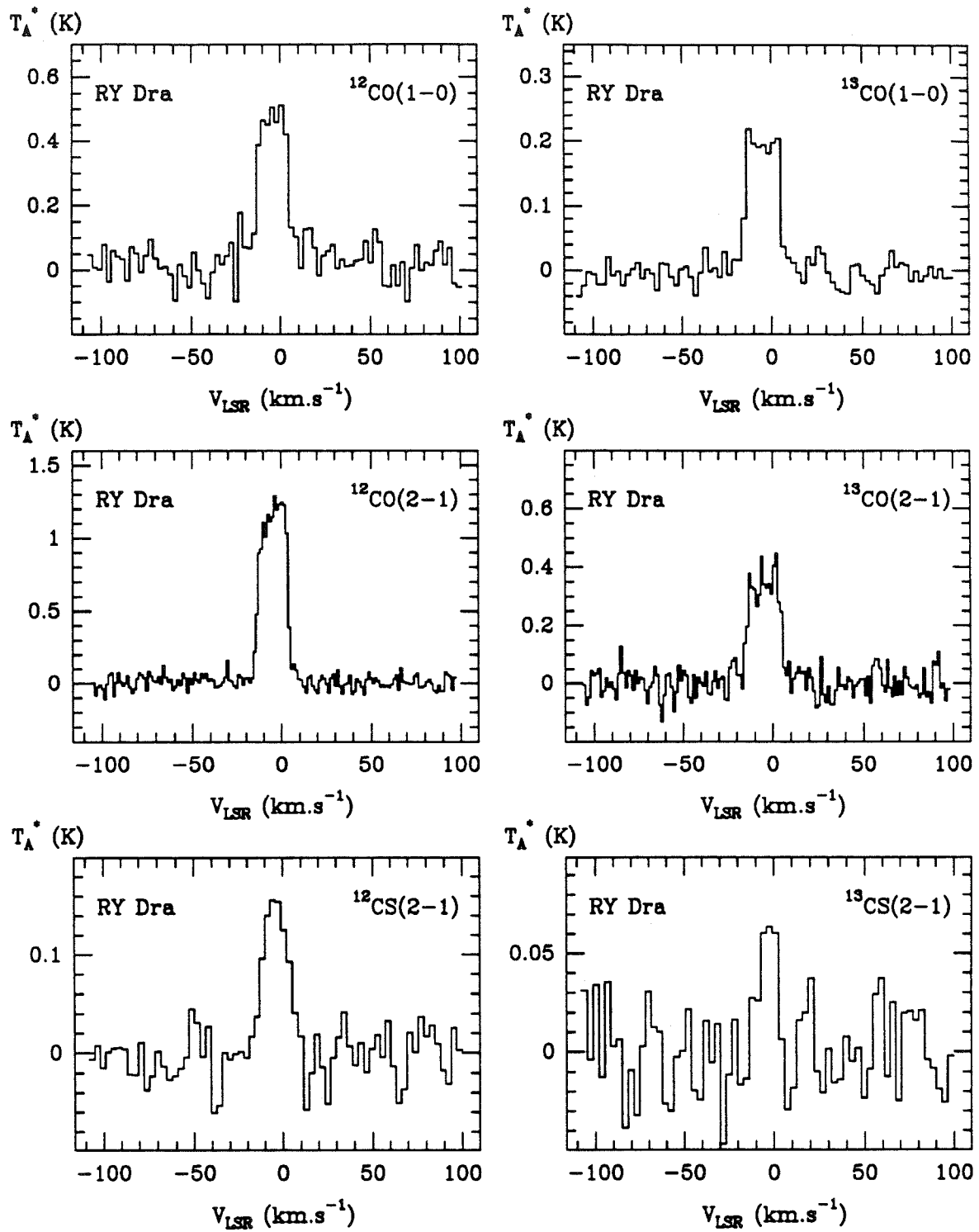


Figure IV.2 : Comme la Figure IV.1, pour l'enveloppe circumstellaire RY Dra. Les coordonnées du point d'observation sont $\alpha = 12^{\text{h}} 54^{\text{m}} 28.1^{\text{s}}$ et $\delta = 66^{\circ} 15' 52''$

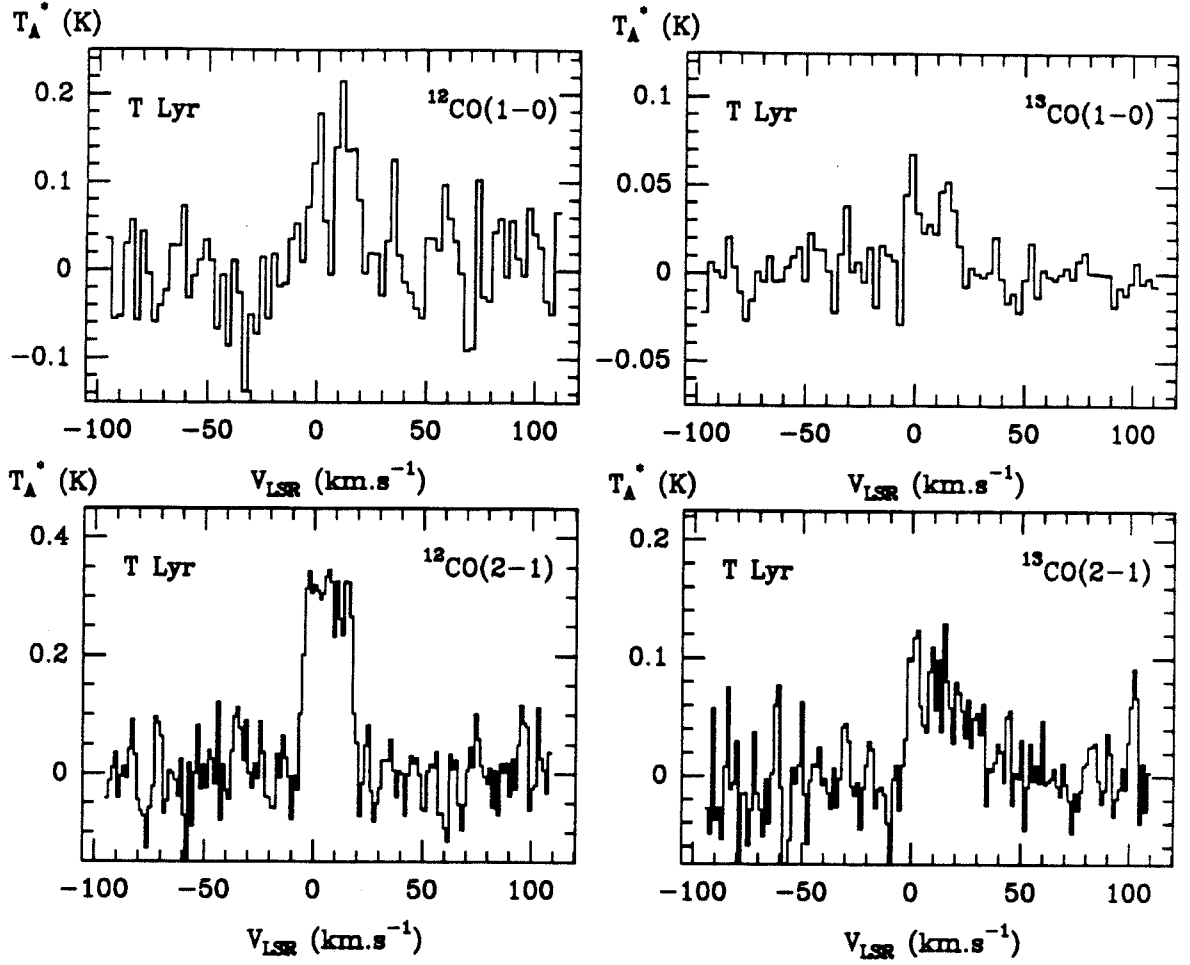


Figure IV.3 : Transitions (1-0) et (2-1) de ^{12}CO et de ^{13}CO observées avec l'antenne de 30m de l'IRAM dans l'enveloppe circumstellaire T Lyr. La résolution spectrale est celle indiquée dans la Figure IV.1. Les coordonnées du point d'observation sont $\alpha = 18^{\text{h}} 30^{\text{m}} 36.2^{\text{s}}$ et $\delta = 36^{\circ} 57' 39''$

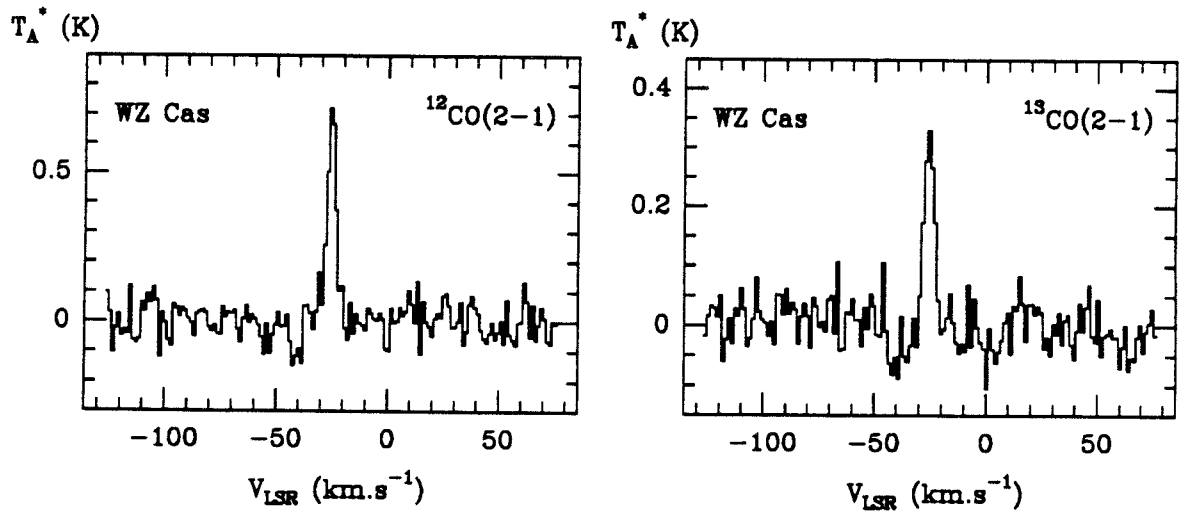


Figure IV.4 : Transitions (2-1) de ^{12}CO et de ^{13}CO observées avec l'antenne de 30m de l'IRAM dans l'enveloppe circumstellaire WZ Cas. La résolution spectrale est celle indiquée dans la Figure IV.1. Les coordonnées du point d'observation sont $\alpha = 23^{\text{h}} 58^{\text{m}} 41.9^{\text{s}}$ et $\delta = 60^{\circ} 04' 37.4''$

Table IV.3 : Paramètres des raies observées dans les 4 enveloppes

ETOILE	TRANSITION	$\int T_A^* dv$ (σ) (K.km/s)		T_A^* (σ) (K)		$V_{LSR}^{(1)}$ (σ) (km/s)		V_{exp} (km/s)
Y CVn	$^{12}\text{CO}(1-0)$	8.4	(0.6)	0.63	(0.09)	21.7	(0.4)	7.0
	$^{13}\text{CO}(1-0)$	5.1	(0.1)	0.35	(0.02)	21.3	(0.4)	8.1
	$^{12}\text{CO}(2-1)$	24.8	(0.2)	1.94	(0.05)	20.8	(0.4)	7.7
	$^{13}\text{CO}(2-1)$	10.6	(0.2)	0.75	(0.03)	20.8	(0.5)	8.1
	$^{12}\text{CS}(2-1)$	2.3	(0.2)	0.20	(0.02)	21.6	(0.8)	7.0
	$^{13}\text{CS}(2-1)$	1.0	(0.1)	0.09	(0.01)	23.2	(0.8)	6.9
RY Dra	$^{12}\text{CO}(1-0)$	8.9	(0.8)	0.49	(0.07)	-4.4	(0.3)	9.9
	$^{13}\text{CO}(1-0)$	4.1	(0.1)	0.19	(0.02)	-4.8	(0.6)	10.3
	$^{12}\text{CO}(2-1)$	20.0	(0.3)	1.20	(0.06)	-4.8	(0.1)	9.0
	$^{13}\text{CO}(2-1)$	8.3	(0.3)	0.34	(0.05)	-5.2	(0.2)	9.6
	$^{12}\text{CS}(2-1)$	2.4	(0.2)	0.15	(0.02)	-4.8	(0.2)	9.5
	$^{13}\text{CS}(2-1)$	0.78	(0.13)	0.06	(0.01)	-4.8	(0.0)	9.5
T Lyr	$^{12}\text{CO}(1-0)^{(2)}$	3.0	(0.4)	0.10	(0.05)	7.4	(0.6)	11.6
	$^{13}\text{CO}(1-0)$	1.0	(0.1)	0.03	(0.01)	7.3	(0.4)	12.2
	$^{12}\text{CO}(2-1)$	7.2	(0.3)	0.31	(0.05)	6.8	(0.2)	12.2
	$^{13}\text{CO}(2-1)$	1.8	(0.3)	0.07	(0.04)	6.8	(0.0)	12.2
WZ Cas	$^{12}\text{CO}(2-1)$	3.2	(0.3)	0.71	(0.06)	-25.4	(0.3)	3.3
	$^{13}\text{CO}(2-1)$	1.6	(0.1)	0.30	(0.05)	-25.4	(0.3)	2.9

(1) : Lorsque l'incertitude indiquée est nulle, la vitesse d'expansion et la vitesse centrale de la raie ont été imposées pour la modélisation du profil.

(2) : Observation refaite en Mars 1988

On peut remarquer, à l'examen des **Figures IV.1 à IV.4** et de la Table IV.3, que l'enveloppe WZ Cas présente des raies très étroites, qui traduisent une faible vitesse d'expansion (~ 3 km/s). C'est une caractéristique inhabituelle parmi les enveloppes circumstellaires, qui présentent des vitesses d'expansion typiques de l'ordre de 15 km/s. Parmi les rares enveloppes à raies étroites, citons Mira ($V_{exp} = 4.9$ km/s, Knapp *et al*, 1982) et Z Psc ($V_{exp} = 3.5$ km/s, Olofsson *et al*, 1987).

Pour chaque enveloppe et pour chaque couple de transitions, nous pouvons estimer le rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ en utilisant le rapport des aires de raies ou celui des températures de brillance au centre des raies, selon les relations (IV.3) et 5IV.4). Afin de tenir compte de la dilution de l'émission dans le lobe (nous avons vérifié que les enveloppes

de Y CVn et de RY Dra étaient non résolues par nos observations, nous avons supposé qu'il en était de même pour les deux autres), nous avons corrigé par un facteur $(v_1/v_2)^{-2}$ les rapports obtenus selon les relations (IV.3) et (IV.4), à partir des températures ou des aires de raies dans le lobe principal, qui figurent dans la **Table IV.3**. L'incertitude sur les intensités au centre des raies ou les intensités intégrées provient, d'une part, de l'incertitude de calibration σ_c , estimée à 10 % de l'intensité, et d'autre part, de l'incertitude due à la modélisation des profils, σ_m , qui figure dans la **Table IV.3**. L'incertitude totale σ_t est donnée par :

$$\sigma_t^2 = \sigma_c^2 + \sigma_m^2 \quad (\text{IV.6})$$

Les incertitudes sur les rapports isotopiques sont données par les différences entre la valeur moyenne T_1 / T_2 et les valeurs maximale, $(T_1 + \sigma_{t1}) / (T_2 - \sigma_{t2})$, et minimale, $(T_1 - \sigma_{t1}) / (T_2 + \sigma_{t2})$, des rapports d'intensités. Les rapports isotopiques ainsi obtenus figurent dans la **Table IV.4**, ainsi que les valeurs déduites par Lambert *et al* (1986), d'observations infrarouges.

Table IV.4 : Rapports isotopiques déduits des observations millimétriques et infrarouges

ETOILE	CO(1-0) ⁽¹⁾	CO(2-1) ⁽¹⁾	CS(2-1) ⁽¹⁾	IR
Y CVn	1.44 (+0.31, -0.25)	2.04 (+0.43, -0.35)	1.83 (+0.64, -0.45)	3.5
	1.57 (+0.41, -0.38)	2.26 (+0.49, -0.39)	1.87 (+0.68, -0.49)	
RY Dra	1.89 (+0.45, -0.36)	2.11 (+0.47, -0.38)	2.60 (+1.04, -0.68)	3.6
	2.25 (+0.59, -0.53)	3.08 (+0.62, -0.83)	2.10 (+1.15, -0.91)	
T Lyr	2.53 (+0.91, -0.67)	3.53 (+1.32, -0.85)		3.2
	2.91 (+3.49, -1.74)	3.87 (+6.15, -1.89)		
WZ Cas		1.68 (+0.48, -0.36)		4.5
		2.07 (+0.68, -0.60)		

(1) Pour chaque enveloppe, la première ligne correspond au rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ déduit des aires de raies et la seconde à celui donné par les températures au centre des raies.

Nous avons également reporté ces rapports dans la **Figure IV.5**, où nous avons, pour chaque transition et chaque étoile, représenté la valeur déduite du rapport des températures au centre des raies en fonction de la valeur fournie par le rapport des aires de raies.

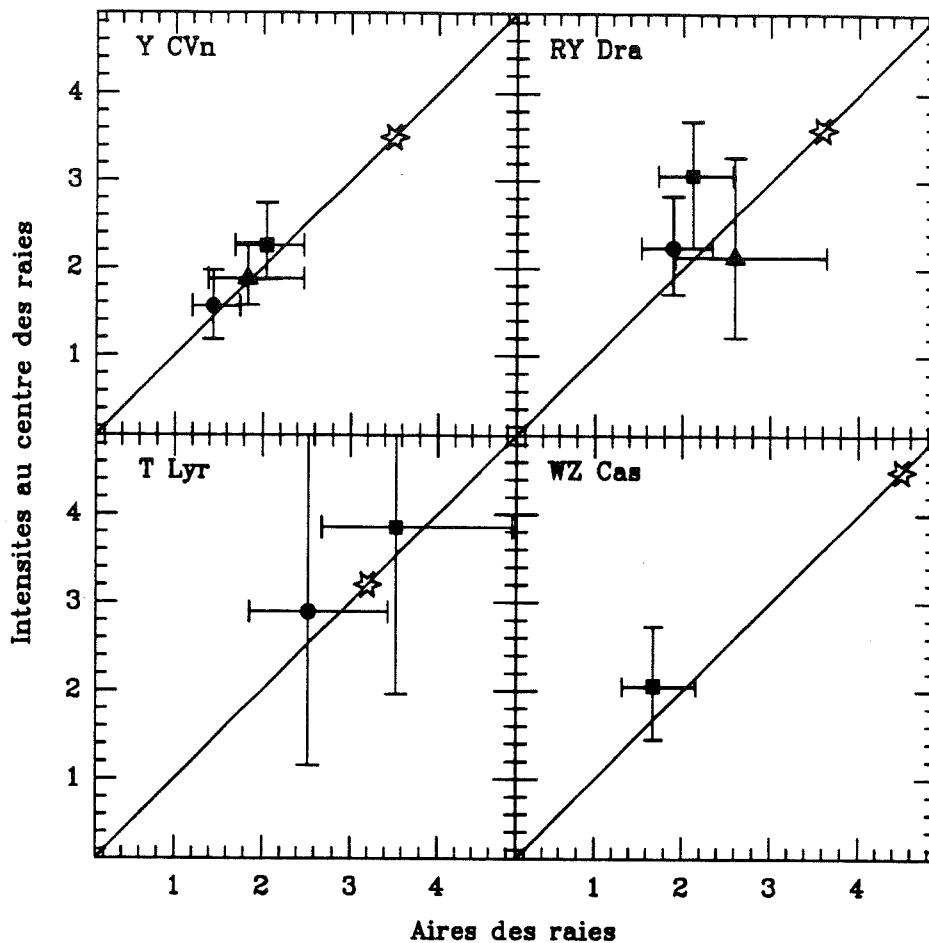


Figure IV.5 : Rapports isotopiques $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ déduits des aires de raies (en abscisse) et des intensités au centre des raies (en ordonnée). Les différents symboles correspondent aux différentes transitions : un cercle pour CO(1-0), un carré pour CO(2-1) et un triangle pour CS(2-1). L'étoile représente la mesure effectuée par Lambert et al (1986) à partir des données IR. Les barres d'erreur correspondent à une incertitude de 1 sigma.

Comme nous l'avons mentionné plus haut, dans le cas où les raies de l'isotope le plus abondant sont optiquement épaisses, le rapport des températures centrales fournit une valeur moins sous-estimée du rapport d'abondance, que le rapport des aires de raies et l'on s'attend donc à une différence significative entre les valeurs calculées par l'une ou l'autre méthode. L'examen de la **Figure IV.5** montre que cet effet est probablement faible dans les quatre enveloppes observées ici et que les deux méthodes fournissent des valeurs compatibles. Il semble alors peu probable que des effets d'opacité puissent affecter sévèrement les rapports isotopiques déduits des observations millimétriques.

En faisant la moyenne pondérée en $1/\sigma^2$ des rapports isotopiques déduits des aires des raies (qui présentent des incertitudes plus faibles que les rapports isotopiques déduits des intensités au centre des raies), on obtient

1.7 (+0.3, -0.2) pour Y CVn
 2.1 (+0.4, -0.3) pour RY Dra
 2.7 (+0.6, -0.4) pour T Lyr
 1.7 (+0.5, -0.4) pour WZ Cas

Sauf, peut-être, dans le cas de TLyr, les rapports $^{12}\text{C} / ^{13}\text{C}$ déduits des observations radio sont plus faibles (d'un facteur de l'ordre de 1.5) que les rapports déduits des observations infrarouges. Cependant, compte-tenu des incertitudes relativement importantes des deux séries de mesures (les incertitudes à 1σ indiquées par Lambert *et al*, sont typiquement de 0.2 à 0.3), cette différence est marginalement significative.

Comme nous l'avons rapidement mentionné dans le chapitre 3, Becker et Iben(1980), ainsi que Renzini et Voli (1981) ont proposé, comme interprétation de l'existence d'étoiles de type J, que l'enrichissement en ^{13}C provient d'une combustion, via le cycle incomplet CN (ou complet, CNO), de l'hydrogène de la base de l'enveloppe convective. Cette combustion n'est possible que si la température à la base de l'enveloppe est suffisante, et seules des étoiles de masse supérieure à une masse limite (dont la valeur varie de 3.3 à 7 M_{\odot} , selon les auteurs) peuvent ainsi devenir des étoiles de type J grâce aux mouvements convectifs, qui sont suffisamment rapides pour que la totalité de l'enveloppe soit amenée à connaître cette combustion. L'enrichissement en ^{13}C qui en résulte est bien sûr limité par la valeur d'équilibre $^{12}\text{C}/^{13}\text{C} = 3.4$, donnée par le rapport des taux des réactions $^{13}\text{C}(p,\gamma)$ et $^{12}\text{C}(p,\gamma)$ du cycle CNO. Cette valeur est très voisine des rapports isotopiques mesurés par Lambert *et al* (1986), et laisse penser que les rapports isotopiques un peu plus faibles, que nous déterminons par les observations radio, pourraient être un peu sous-estimés en raison de l'opacité non totalement négligeable des raies des isotopes ^{12}C . L'observation des raies (5-4) de ^{12}CS et ^{13}CS , ainsi que des raies des isotopes de CN, qui ont, dans une enveloppe au moins (YCVn), des intensités suffisantes, devrait aider à résoudre la question.

Il est également possible de suggérer une autre interprétation, beaucoup plus spéculative, de l'écart, faible mais systématique, entre les valeurs des rapports isotopiques déterminés par les observations radio et les observations infrarouges. La première objection à lever, pour défendre l'idée d'un écart réel et non d'un artefact dû à la méthode de

détermination des rapports isotopiques, est celle de la valeur minimale, égale à 3.4, du rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ imposé par le modèle d'enrichissement en ^{13}C par combustion de l'enveloppe.

Or, ce modèle se heurte à deux difficultés (Harris *et al*, 1987): le cycle CNO ne peut pas réduire le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ sans simultanément augmenter l'abondance de ^{14}N au détriment de ^{12}C , si bien que d'une part, les conditions sur la masse de l'étoile qui permettent d'obtenir simultanément un rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ voisin de 3.4, tout en gardant un rapport $\text{C/O} > 1$ sont extrêmement strictes, et surtout, d'autre part, l'abondance relative N/O prédite par le modèle est supérieure d'un facteur 5 au rapport d'abondances observé. Cette dernière objection est jugée par Harris *et al* (1987) suffisamment forte (à moins de supposer une erreur d'un facteur 5 sur l'abondance mesurée de l'azote, ce qui n'est pas totalement exclu) pour que ces auteurs écrivent que *"no form of the CNO cycle, in any astrophysical site, at any temperature, can explain the $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ and N/O ratios in J-type carbon stars"*. Ils proposent, comme explication alternative, le seul autre mécanisme de nucléosynthèse capable d'enrichir la matière stellaire en ^{13}C , la combustion explosive de l'hydrogène. D'après les calculs de Audouze *et al* (1973), il est ainsi possible, par exemple, (pour une température de 10^8 K, une densité de 100 g.cm^{-3} , et une durée de combustion de 100 à 1000s), d'obtenir un rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ de 1, sans augmentation importante de l'abondance de ^{14}N . Si l'on admet un tel mécanisme d'enrichissement en ^{13}C des étoiles de type J, il est alors tout à fait acceptable d'obtenir des rapports isotopiques $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ inférieurs à 3.4. On peut alors suggérer que la différence entre les valeurs obtenues grâce aux observations radio et aux observations infrarouge provient de ce que les deux méthodes n'échantillonnent pas le même gaz de l'enveloppe. Les raies millimétriques de CO et de ses isotopes proviennent probablement essentiellement de couches relativement externes de l'enveloppe (voir la discussion du chapitre 2 sur l'excitation des raies millimétriques dans l'enveloppe IRC+10216), alors que les raies infrarouges en absorption se forment dans les régions internes de l'enveloppe (voir le modèle de structure de l'enveloppe IRC+10216 présenté au chapitre 3). Si l'on suppose que, typiquement, le gaz vu en émission radio de CO est à une distance de quelques 10^{17} cm de l'étoile, alors que le gaz vu en absorption IR est à quelques 10^{15} cm de l'étoile, et que la vitesse d'expansion de l'enveloppe est de 10 km/s, le gaz vu en radio est environ 10^4 ans plus vieux que le gaz vu en IR. Il est alors fort possible que la différence entre les deux rapports isotopiques s'explique par l'évolution de la composition isotopique de la matière qui arrive à la surface de l'étoile pendant ces 10^4 ans (en particulier, le mélange de matière issue du coeur de carbone de l'étoile, aurait pour effet une augmentation du rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$). Avant d'essayer de poursuivre dans la voie de cette explication, il reste bien sûr à établir la réalité du désaccord entre les mesures radio et

infrarouges, en multipliant les premières, ainsi que nous le suggérons plus haut. Il peut être également intéressant de tester, indépendamment du résultat des nouvelles mesures du rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$, si l'hypothèse d'un enrichissement par combustion explosive de l'hydrogène peut être étayée par d'autres observations: ce mécanisme doit en effet modifier également les rapports isotopiques de l'azote et de l'oxygène.

IV. MESURE DES RAPPORTS ISOTOPIQUES DE L'OXYGENE DANS CINQ ENVELOPPES

A. Position du problème

Depuis une dizaine d'années, la mesure des rapports isotopiques de l'oxygène, ($^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ et $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$), dans différents sites de la Galaxie, (voisinage du Soleil, nuages moléculaires du Disque Galactique, nuages moléculaires du Centre Galactique, enveloppes de Géantes Rouges), a fait l'objet de nombreux travaux. La détermination de ces rapports isotopiques dans les nuages moléculaires repose sur l'observation des raies rotationnelles de molécules oxygénées, principalement CO, quelquefois HCO^+ , H_2CO et OH (voir en particulier Wannier, 1980; Stark, 1981; Kutner *et al*, 1980; Penzias, 1981b; Bujarrabal *et al*, 1983). Les observations des raies IR en absorption des isotopes de CO ont permis la mesure des rapports isotopiques de l'oxygène dans les enveloppes circumstellaires d'une douzaine de géantes rouges oxygénées K et M (Harris et Lambert, 1984; Harris *et al*, 1988), d'une douzaine d'étoiles MS, S et SC (Harris *et al*, 1985; Wallerstein *et al*, 1985) et de 26 étoiles carbonées (Harris *et al*, 1987). En outre, Wannier et Sahai (1987) ont effectué la mesure de ces mêmes rapports isotopiques à partir d'observations radio dans deux étoiles carbonées (IRC+10216 et CRL2688). Les moyennes des valeurs obtenues dans le milieu interstellaire et la gamme des valeurs mesurées dans les enveloppes d'étoiles Géantes Rouges sont reportés dans la **Table IV.5**.

Table IV.5 : Rapports isotopiques de l'oxygène dans la Galaxie

Localisation	$^{16}\text{O} / ^{18}\text{O}$	$^{16}\text{O} / ^{17}\text{O}$	$^{17}\text{O} / ^{18}\text{O}$
Système Solaire	490	2630	0.186
Disque Galactique	700 ± 200	2400 ± 800	0.27 ± 0.01
Centre Galactique	250 ± 100	900 ± 400	0.29 ± 0.02
Géantes Rouges	400 - 4600	200 - 3000	0.5 - 3.1

Les mesures du rapport isotopique $^{16}\text{O} / ^{18}\text{O}$ dans le milieu interstellaire présentent une assez grande dispersion mais restent assez voisines du rapport terrestre, sauf dans le Centre Galactique, qui présente une surabondance de l'isotope ^{18}O , d'un facteur 2 environ.

En revanche, les géantes rouges présentent des valeurs de ce rapport qui s'étalent sur une décade, à partir de la valeur terrestre. Le rapport $^{16}\text{O} / ^{17}\text{O}$ est proche du rapport terrestre dans le milieu interstellaire, hors Centre Galactique, notablement plus faible dans le Centre Galactique et présente une dispersion considérable (d'un facteur 15) dans les enveloppes des Géantes Rouges. Le rapport $^{17}\text{O} / ^{18}\text{O}$ est mesuré avec une grande précision dans les nuages moléculaires et présente, dans le milieu interstellaire, une valeur remarquablement constante, égale à une fois et demi la valeur terrestre. Dans les enveloppes des géantes rouges, ces valeurs sont très dispersées, mais toutes nettement plus élevées que la valeur interstellaire, et a fortiori, la valeur terrestre.

Le défi posé par les rapports isotopiques de l'oxygène est donc double :

- d'une part, une question de nucléosynthèse : d'où provient l'énorme dispersion des rapports isotopiques de l'oxygène dans les enveloppes des Géantes Rouges et en particulier, comment obtenir un enrichissement en ^{17}O par rapport à ^{18}O à la fois aussi élevé et aussi variable ?

- d'autre part, un problème d'évolution chimique de la Galaxie : pourquoi le rapport d'abondance $^{17}\text{O}/^{18}\text{O}$ montre-t-il une telle uniformité dans les nuages moléculaires, alors qu'il est très variable dans les enveloppes circumstellaires et d'où provient la surabondance en ^{18}O propre au Centre Galactique ?

Afin de résoudre la première question, il est nécessaire de multiplier les mesures des rapports isotopiques de l'oxygène, dans des enveloppes de géantes rouges présentant des stades d'évolution différents. Les mesures dans les enveloppes peu opaques, accessibles aux observations IR proche ($2\text{ }\mu\text{m}$) sont relativement nombreuses. En revanche, les mesures dans les Géantes Rouges très évoluées, impossibles en IR proche à cause de l'opacité considérable de leur enveloppe, n'avaient jusqu'à présent pû être effectuées en radio que dans deux enveloppes d'étoiles carbonées (IRC+10216 et CRL2688), par Wannier et Sahai (1987), en raison de la faiblesse des raies millimétriques des isotopes rares de l'oxygène.

En outre, la résolution spectrale limitée, (surtout à basse fréquence), et les relativement faibles rapports signal/bruit des observations de Wannier et Sahai ne permettent pas une bonne définition de la forme des raies; or, tout du moins dans l'enveloppe IRC+10216, les coïncidences accidentelles de raies faibles ne sont pas rares, si bien que les rapports isotopiques ainsi obtenus peuvent être gravement faussés par de telles coïncidences, qui ne peuvent être mises en évidence que lorsque le profil de la raie est très bien défini.

La détection et l'identification des raies des isotopes ^{29}Si et ^{30}Si de SiCC dans l'enveloppe IRC+10216, (voir Cernicharo *et al.*, 1986c et le chapitre 3), nous a conduit à découvrir que la raie ($J=1-0$) de C^{17}O est partiellement superposée à la raie $J_{K-1K+1} = 5_{05} - 4_{04}$ de $^{30}\text{SiCC}$ (voir la Figure 1 de Cernicharo *et al.*, 1987b). Cette observation ayant contribué à confirmer que le télescope de 30m de l'IRAM apporte un gain en sensibilité important pour l'observation des enveloppes circumstellaires, nous avons entrepris la mesure des rapports isotopiques de l'oxygène, par l'observation des raies ($J=1-0$) et ($J=2-1$) de CO et de ses isotopes, dans cinq enveloppes d'étoiles carbonées, présentant des raies intenses de l'isotope principal, et correspondant à des stades d'évolution avancés mais différents : 2 étoiles carbonées au stade AGB (CIT6 et IRC+10216), deux pre-nébuleuses planétaires (CRL2688 et CRL618) et une nébuleuse planétaire (NGC7027).

B. Les observations

Les observations ont été réalisées en Août 1988 avec le radiotélescope de 30m de l'IRAM. Les procédures d'observation utilisées sont analogues à celles décrites plus haut (voir par exemple les observations des étoiles de type J). Les récepteurs, de type SIS, étaient réglés en mode double bande et le rapport de gain des bandes signal et image a été calibré en utilisant un filtre Fabry-Pérot. L'incertitude sur la calibration des raies qui en résulte est inférieure à 10%. Les observations ont été faites en deux jours consécutifs, si bien que les intensités des raies ne risquent pas d'être affectées par la variabilité de l'émission IR des étoiles. L'opacité atmosphérique était faible, même à 1 mm, et nous avons calibré les températures d'antenne toutes les 15 mn environ. En tenant compte de ces divers facteurs, nous estimons l'incertitude totale sur l'intensité des raies à 10 %. Quelques spectres ont été observés en utilisant la méthode de permutation de position décrite plus haut, la plupart ont bénéficié du dispositif de miroir secondaire vibrant, nouvellement mis en service, qui permet d'obtenir des lignes de bases extrêmement plates. Les paramètres observationnels typiques sont résumés dans la **Table IV.6**.

Table IV.6 : Paramètres observationnels

Transition	Fréquence (MHz)	T _{DSB}	HPBW	η	τ	T _{sys}
¹² CO(1-0)	115271.2	240 K	21"	0.60	0.30	900
¹² CO(2-1)	230538.0	170 K	12"	0.45	0.10	400
¹³ CO(1-0)	110201.4	220 K	21"	0.60	0.08	400
¹³ CO(2-1)	220398.7	150 K	12"	0.45	0.20	450
C ¹⁸ O(1-0)	109782.2	220 K	21"	0.60	0.12	450
C ¹⁸ O(2-1)	219560.3	150 K	12"	0.45	0.10	400
C ¹⁷ O(1-0)	112359.4 ⁽¹⁾	230 K	21"	0.60	0.25	600
C ¹⁷ O(2-1)	224714.4 ⁽¹⁾	160 K	12"	0.45	0.20	600

(1) Fréquence moyenne du multiplet de structure hyperfine

Les raies (J=1-0) et (J=2-1) de ¹²CO, ¹³CO et C¹⁷O ont été détectées dans les cinq enveloppes. Les raies de C¹⁸O sont détectées dans 3 enveloppes (CRL2688, NGC7027 et IRC+10216), marginalement détectées dans CRL618 et non détectées dans CIT6. Les spectres observés dans les 5 enveloppes, dans les émissions (J=1-0) et (J=2-1) de ¹²CO, ¹³CO, C¹⁸O et C¹⁷O sont représentés dans les Figures IV.6 à IV.10 (seules des lignes de base de degré 1 ont été soustraites aux spectres). Les intensités des raies y sont exprimées en températures d'antenne T_A^{*}.

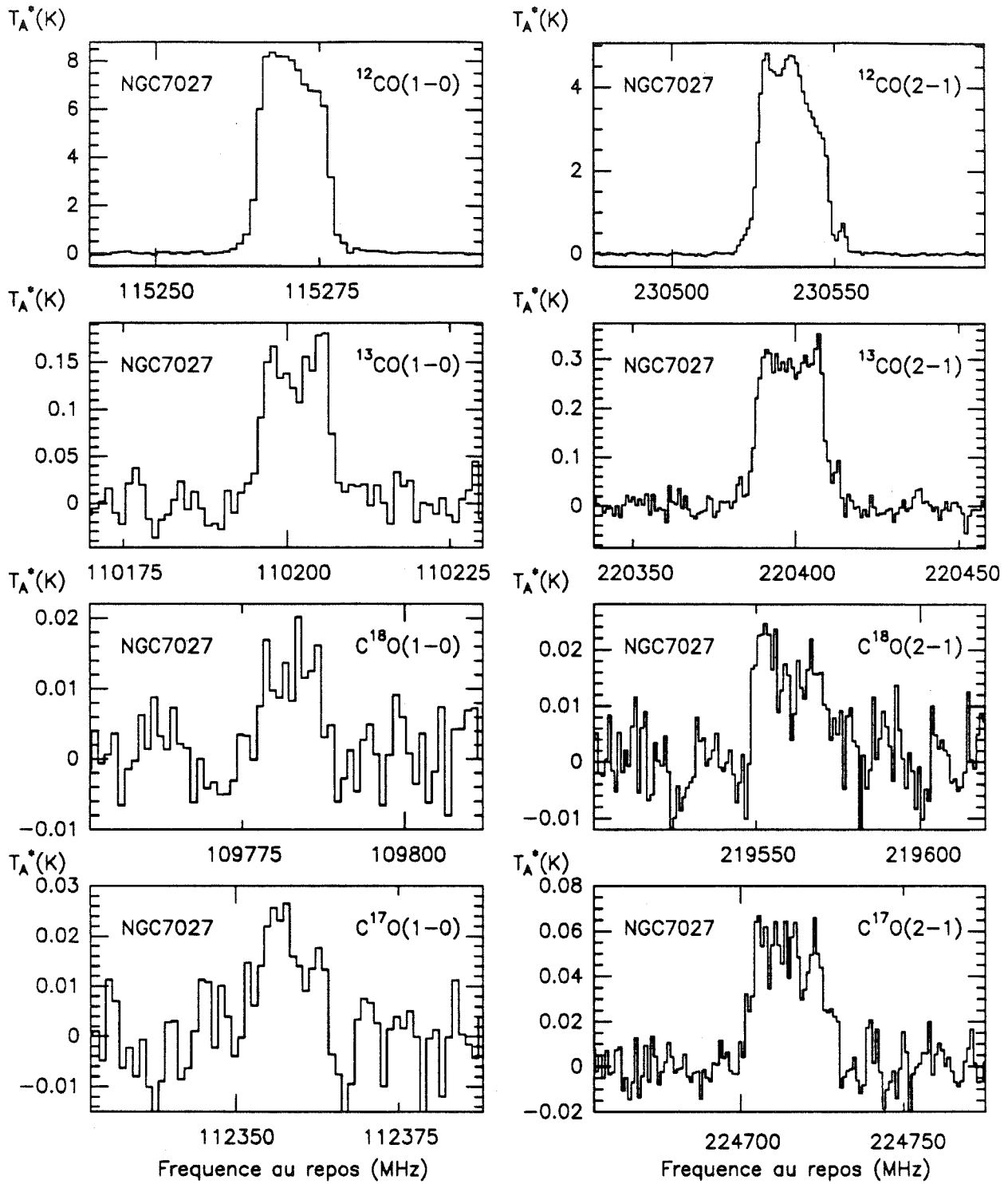


Figure IV.6 : Raies ($J=1-0$) et ($J=2-1$) des isotopes de CO observées dans l'enveloppe NGC7027 avec le télescope de 30m de l'IRAM. La résolution en vitesse est de 2.6 km/s à 110 GHz et 1.3 km/s à 220 GHz. Seuls des polynômes de degré 1 ont été soustraits aux spectres. Les coordonnées de la position observées sont $\alpha = 21^{\text{h}} 05^{\text{m}} 09.4^{\text{s}}$ et $\delta = 42^{\circ} 02' 03''$.

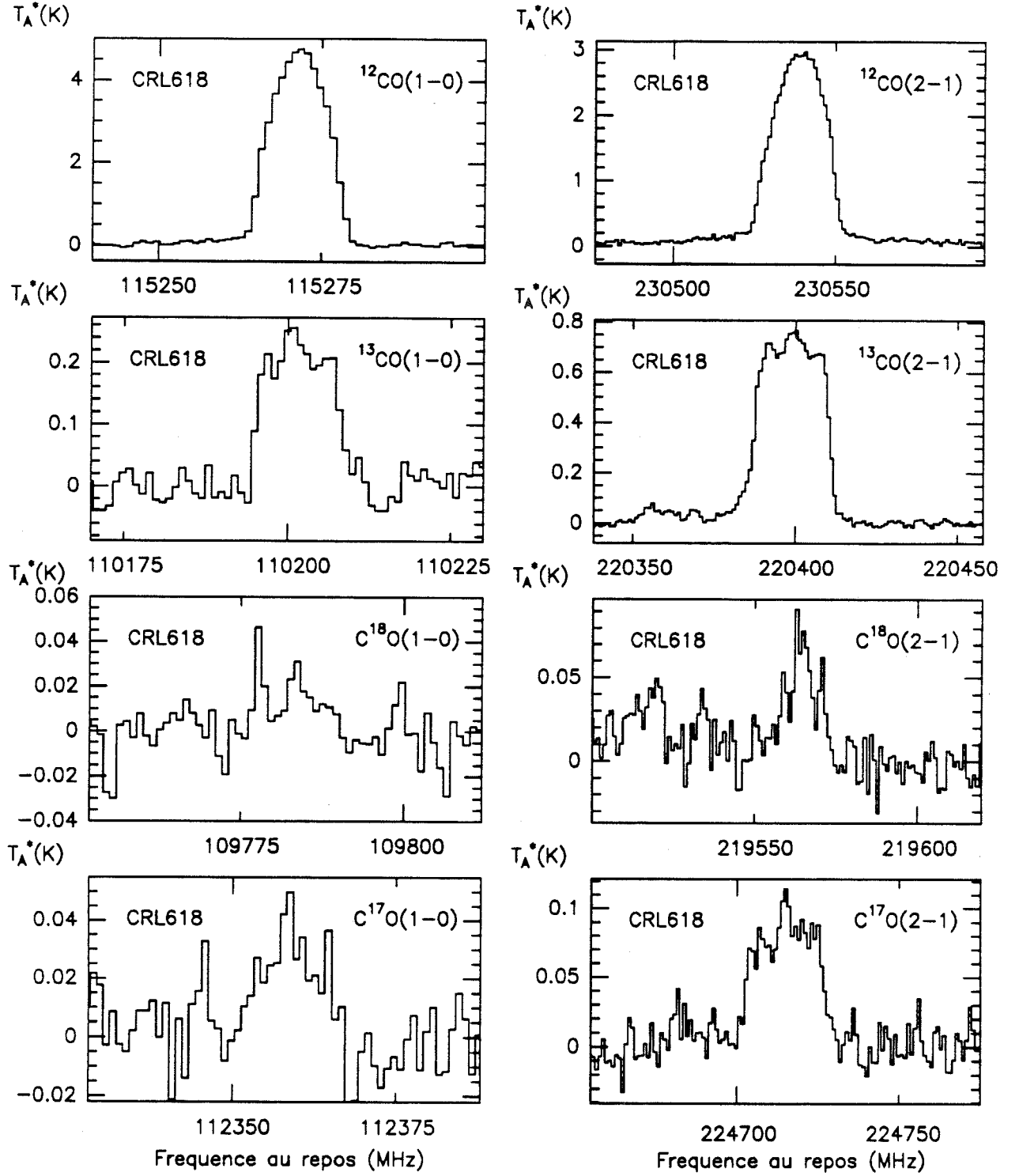


Figure IV.7 : Comme la Figure IV.6 pour l'enveloppe CRL618. Les coordonnées de la position observées sont $\alpha = 04^{\text{h}} 39^{\text{m}} 34.0^{\text{s}}$ et $\delta = 36^{\circ} 01' 16''$.

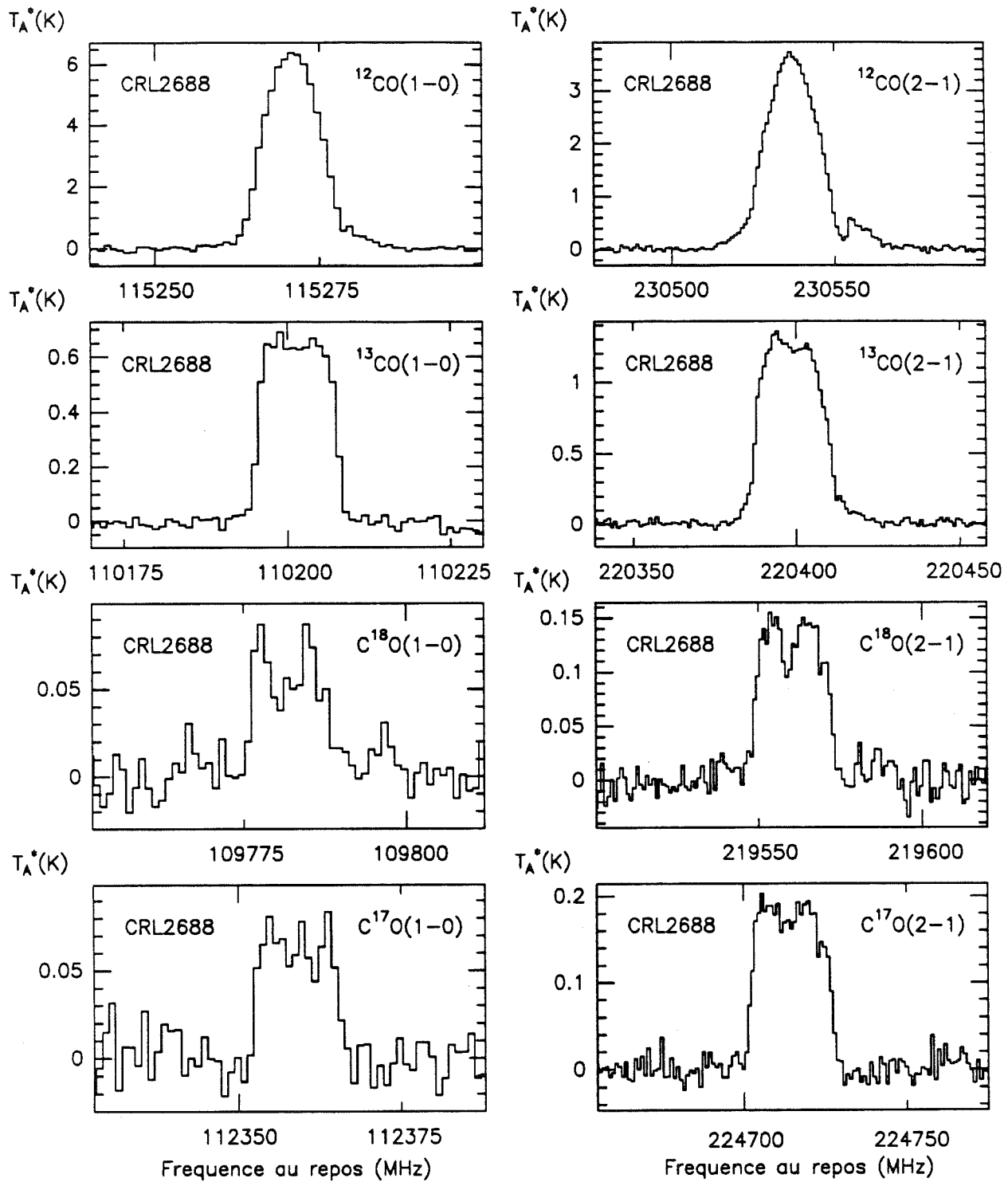


Figure IV.8 : Comme la Figure IV.6 pour l'enveloppe CRL2688. Les coordonnées de la position observées sont $\alpha = 21^{\text{h}} 00^{\text{m}} 19.9^{\text{s}}$ et $\delta = 36^{\circ} 29' 45''$.

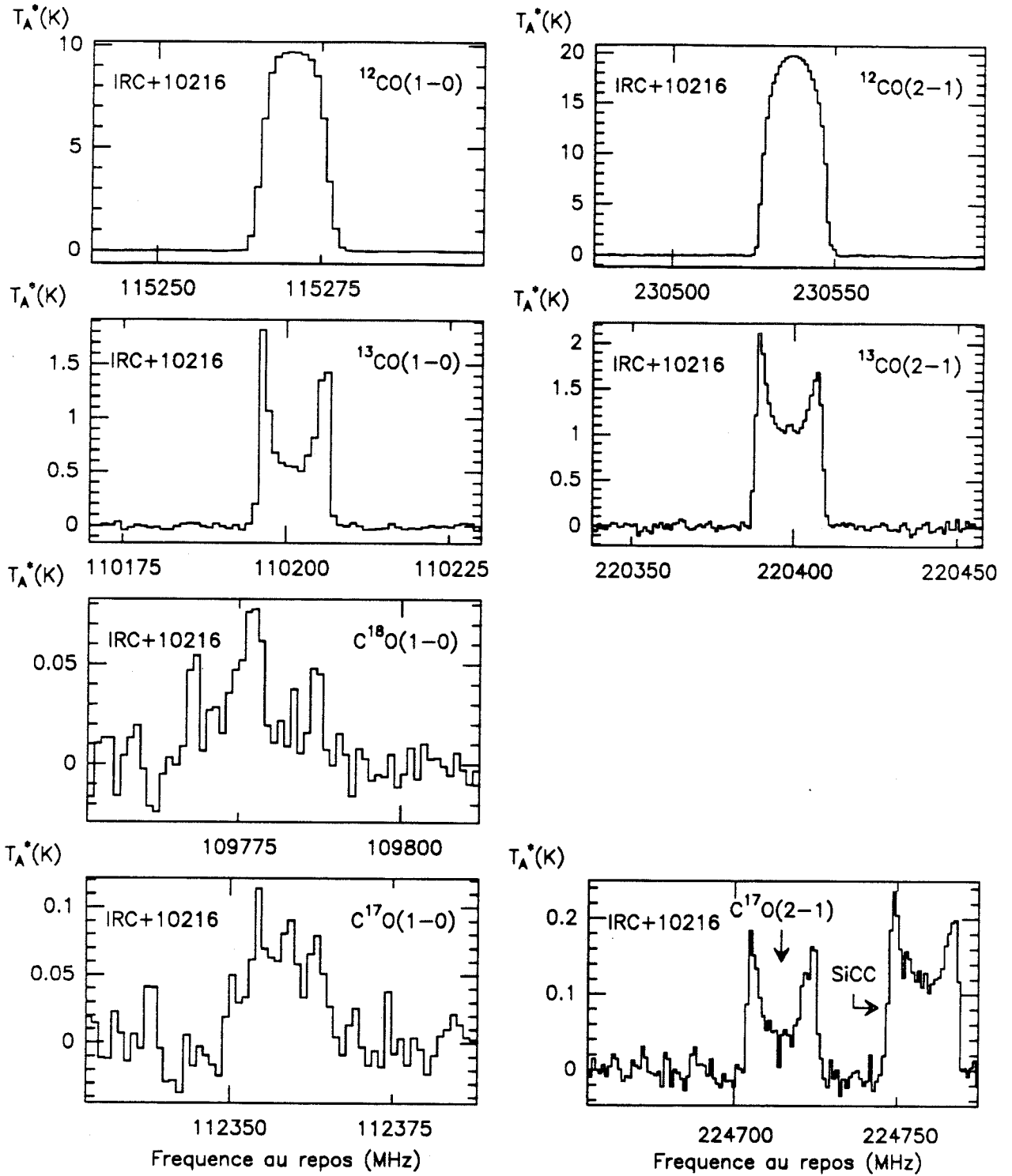


Figure IV.9 : Comme la Figure IV.6 pour l'enveloppe IRC+10216. Les coordonnées de la position observées sont $\alpha = 09^{\text{h}} 45^{\text{m}} 14.8\text{s}$ et $\delta = 13^{\circ} 30' 40''$.

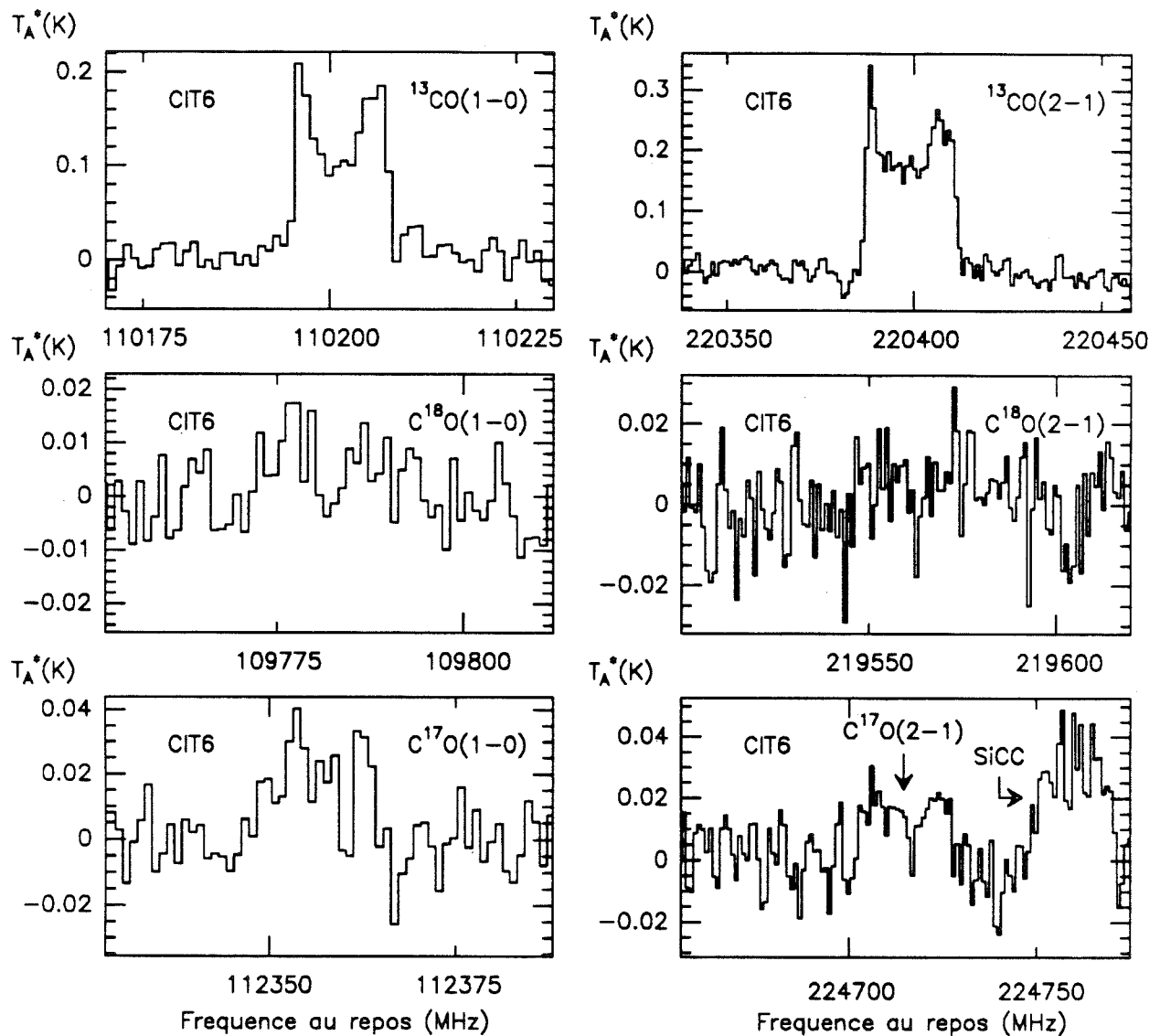


Figure IV.10 : Comme la Figure IV.6 pour l'enveloppe CIT6. Les coordonnées de la position observées sont $\alpha = 10^{\text{h}} 13^{\text{m}} 11^{\text{s}}$ et $\delta = 30^{\circ} 49' 17''$.

C. Réduction des données

1. Analyse des spectres

Nous avons modélisé les raies observées, par des profils typiques d'enveloppes sphériques en expansion (paraboles à courbure positive ou négative, tronquées et convoluées à la résolution spectrale de 1MHz). Pour les raies faibles, la largeur en vitesse du profil a été fixée à la valeur fournie par les raies plus fortes, observées dans la même source et dans certains cas, nous avons également imposé la fréquence centrale de la raie.

Pour les deux pre-nébuleuses planétaires, CRL2688 et CRL618, ainsi que pour la nébuleuse planétaire NGC7027, les profils des raies (en particulier ceux de ^{12}CO , et, dans une moindre mesure, ceux de ^{13}CO) diffèrent sensiblement des profils modèles supposés (voir les **Figures IV.6, IV.7 et IV.8**). Cependant, l'incertitude sur l'intensité intégrée des raies qui en résulte, demeure très inférieure à l'incertitude de calibration.

Trois spectres ont été interprétés comme la superposition de deux raies de fréquences légèrement différentes :

1. La raie ($J=1-0$) de C^{17}O possède une fréquence centrale qui ne diffère que de 5 MHz de celle de la raie $J_{K-1K+1} = 5_{05} - 4_{04}$ de $^{30}\text{SiCC}$. Dans l'enveloppe IRC+10216, où les raies de cette fréquence ont une largeur à la base de 11 MHz, il en résulte un recouvrement très important des deux raies, qui se traduit par un profil tout à fait différent des profils en U que l'on attend pour les raies optiquement minces issues d'une source résolue (voir la **Figure IV.9**; comparer en particulier les spectres de C^{17}O (1-0) et (2-1)). Nous avons donc modélisé la raie observée par deux composantes, de largeur à la base fixée à 14.5 km/s, vitesse d'expansion de l'enveloppe IRC+10216, mesurée grâce à de très nombreuses raies moléculaires, et de fréquences centrales fixées à 112354.8 MHz, fréquence que nous avons calculée pour la raie de $^{30}\text{SiCC}$, et à 112359.3 MHz, fréquence moyenne du multiplet de structure hyperfine de la raie de C^{17}O (la structure hyperfine de la raie, dont les composantes extrêmes ne sont distantes que de 1.3 MHz, c'est-à-dire environ le dixième de la largeur de la raie, a été négligée). Les profils modèles sont superposés à la raie observée dans la **Figure IV.11c** et la **Figure IV.11d** représente le même spectre, auquel on a soustrait le profil modèle ajusté à la raie de $^{30}\text{SiCC}$. On remarquera que les deux raies modèles ont la forme en U attendue. Nous avons également vérifié que l'intensité intégrée de la raie de

$^{30}\text{SiCC}$ est environ 30 fois plus faible que celle de la transition correspondante, optiquement mince elle aussi, de l'isotope principal $^{28}\text{SiCC}$, en accord avec le rapport isotopique $^{28}\text{Si}/^{30}\text{Si}$ que nous avons mesuré dans cette enveloppe.

2. Nous avons examiné les spectres de $\text{C}^{17}\text{O}(1-0)$ dans les quatre autres enveloppes, à la recherche d'un élargissement et d'une asymétrie pouvant indiquer la présence de la raie de $^{30}\text{SiCC}$. Seule la raie observée dans CIT6 nous a paru présenter ces deux caractéristiques. Cette constatation est à rapprocher de la détection dans cette enveloppe d'une raie de SiCC (la transition $5_{05} - 4_{04}$ précisément) par Knapp et Morris (1985). Nous avons, comme dans le cas d'IRC+10216, modélisé l'émission observée par deux composantes de largeurs et de fréquences fixées (la largeur a été prise égale à 16.4 km/s, valeur indiquée par la raie (2-1) de ^{13}CO). Les résultats de la modélisation des deux raies et de la soustraction de la raie de $^{30}\text{SiCC}$ sont représentés dans les **Figures IV.11a** et **IV.141b**.

3. La raie $\text{C}^{18}\text{O}(1-0)$ de IRC+10216 apparaît accolée à une raie inconnue, qui peut appartenir, soit à la bande signal (à 109771 MHz) soit à la bande image (à 102891 MHz), le spectre de la même raie présenté par Wannier et Sahai (1987) est en effet trop bruyant pour que l'on puisse décider si la raie inconnue y est présente ou non. Les deux raies que nous avons détectées ont été modélisées par des profils théoriques, de largeur et de fréquence, libres pour la raie inconnue, fixées pour la raie de C^{18}O . Les profils modèles sont superposés au spectre dans la **Figure IV.11e** et la **Figure IV.11f** représente la raie de $\text{C}^{18}\text{O}(1-0)$ seule. La raie inconnue accolée à celle de $\text{C}^{18}\text{O}(1-0)$ n'est visible dans aucune des autres enveloppes.

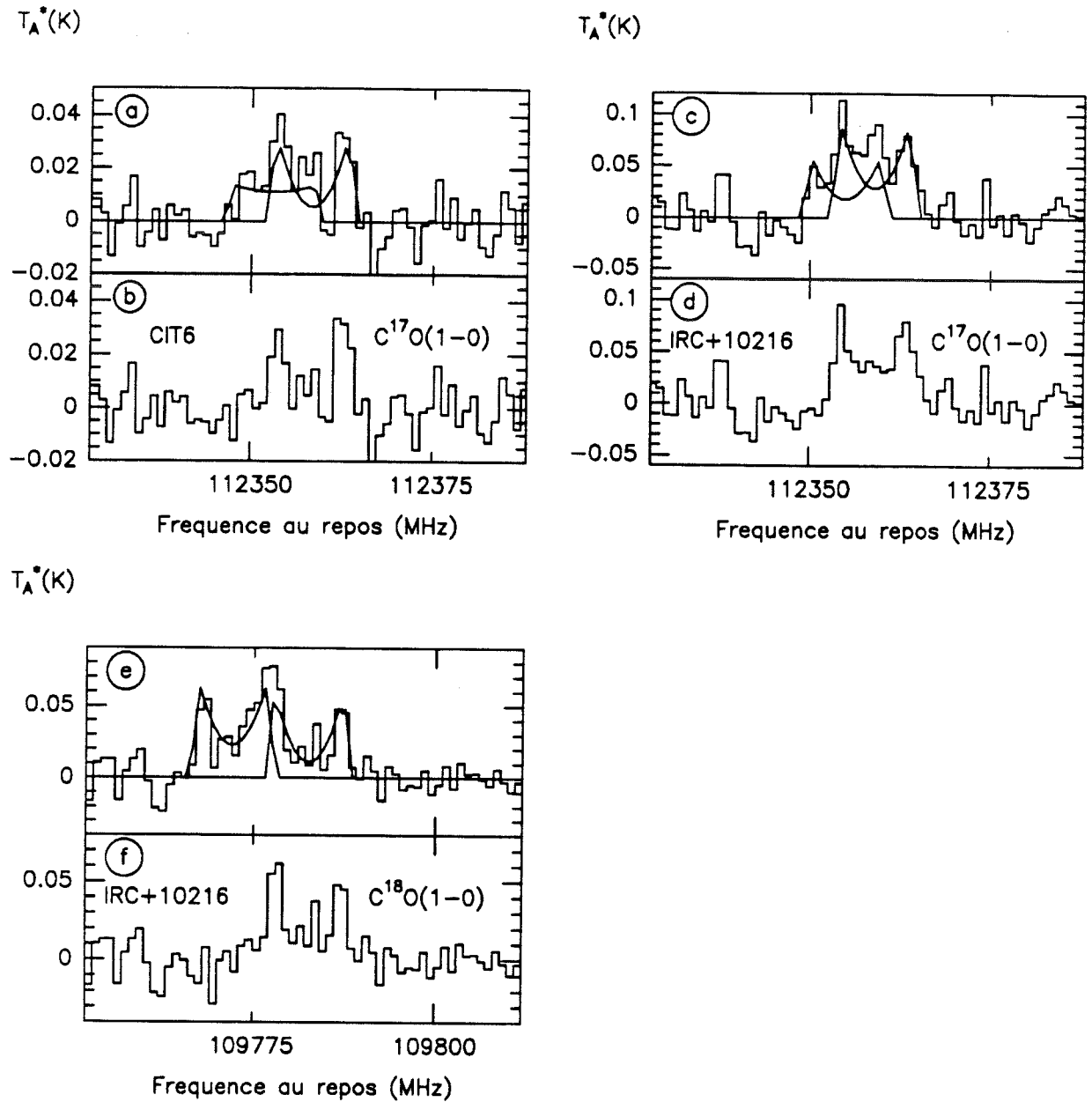


Figure IV.11 : Ajustement de profils à deux composantes aux spectres observés et raies des isotopes de CO résiduelles obtenus en soustrayant le profil modèle ajusté sur la raie compagnon.

Comme nous l'avons souvent souligné, les formes de raies dans les enveloppes circumstellaires sont de bons indicateurs de l'opacité des raies et des dimensions relatives de

la source et du lobe. Nous interprétons les profils observés dans les cinq enveloppes, de la façon suivante :

- Dans les quatre enveloppes où elles ont été observées, les raies de ^{12}CO présentent des profils paraboliques, caractéristiques d'une émission optiquement épaisse.

- Les raies en U de ^{13}CO d'IRC+10216 et CIT6 sont caractéristiques d'une émission optiquement mince et spatialement résolue, et il en est bien sûr de même des raies des isotopes rares de l'oxygène dans ces deux enveloppes.

- Dans le cas de NGC7027, et plus encore de CRL2688, la forme en U des raies de ^{13}CO est peu marquée. Certains des spectres des isotopes rares, qui présentent des émissions très certainement optiquement minces, sont trop bruyants pour que leur forme soit très clairement définie, mais les raies de $\text{C}^{18}\text{O}(2-1)$ dans les deux enveloppes et celle de $\text{C}^{18}\text{O}(1-0)$ dans CRL2688 présentent des formes qui évoquent un profil en U, d'émission résolue, plutôt qu'un profil plat d'émission non résolue. En revanche, la raie $\text{C}^{17}\text{O}(2-1)$ de CRL2688, dont le rapport signal/bruit est très bon, apparaît peu creusée, ce qui indique une résolution spatiale imparfaite. Nous concluons donc que, pour l'enveloppe NGC7027, la forme peu creusée des raies de ^{13}CO est due à l'opacité non négligeable de ces transitions, plutôt qu'à une résolution spatiale imparfaite de la source; dans le cas de CRL2688, la situation est plus confuse, mais il est probable que les deux effets (opacité et manque de résolution spatiale) expliquent la forme des raies de ^{13}CO (sans même parler des ailes à grande vitesse, très visibles sur les spectres de ^{12}CO et sur la raie $J=2-1$ de ^{13}CO). Nos conclusions sont en accord avec les observations de Knapp *et al* (1982), qui estiment la largeur à mi-puissance de la source CO de NGC7027 à $50'' \times 38''$, c'est-à-dire bien supérieure à celle du lobe du 30m de l'IRAM à 110 GHz, alors que la largeur à mi-puissance de CRL2688 est plus faible. L'enveloppe de NGC7027 a été également cartographiée en émissions ^{12}CO et $^{13}\text{CO}(2-1)$ par Cox *et al*, (1989) avec l'antenne de 30m de l'IRAM, et la largeur à mi-puissance de la source est d'environ $40''$.

- Dans le cas de CRL618, les raies de ^{13}CO ont une forme plate très marquée, caractéristique des émissions optiquement minces et non résolues et les raies de C^{17}O présentent, elles aussi, un profil plat. Cette interprétation des formes de raies dans CRL618 est tout à fait cohérente avec les cartes d'émission $^{12}\text{CO}(J=1-0)$ et $(J=2-1)$ réalisées par Bachiller *et al* (1988), avec l'antenne de l'IRAM également, qui indiquent respectivement des largeurs de source à mi-puissance de $20''$ et de $11''$, c'est-à-dire l'une et l'autre non résolues par le lobe de l'antenne.

Les paramètres des raies (intensité intégrée, demi-largeur à la base et vitesse centrale), déduits de la modélisation des spectres observés, par des profils théoriques, sont rassemblés dans la **Table IV.7**. Lorsque le spectre résulte de la superposition de deux raies, les paramètres des deux composantes sont indiqués dans la Table. Les intensités intégrées y sont exprimées en termes de température de brillance dans le lobe principal; elles ont été calculées en utilisant les valeurs de rendement en lobe portées dans la **Table IV.6**.

Table IV.7 : Paramètres des raies de CO et de ses isotopes

Enveloppe	Molécule	$\int T_{mb} dv$ (K.km/s)	(σ)	V_{exp} (km/s)	(σ)	V_{LSR} (km/s)
NGC7027	$^{12}\text{CO}(1-0)$	384.	(1.3)	15.4	(0.5)	25.2
	$^{12}\text{CO}(2-1)$	253.	(1.4)	15.6	(1.0)	27.4
	$^{13}\text{CO}(1-0)$	7.77	(0.26)	15.5	(1.2)	25.9
	$^{13}\text{CO}(2-1)$	18.8	(0.29)	14.9	(0.8)	25.4
	$\text{C}^{18}\text{O}(1-0)$	0.596	(0.096)	15.0	(0.0)	25.4
	$\text{C}^{18}\text{O}(2-1)$	1.10	(0.08)	15.0	(0.0)	25.4
	$\text{C}^{17}\text{O}(1-0)$	0.916	(0.125)	15.0	(0.0)	25.4
	$\text{C}^{17}\text{O}(2-1)$	1.87	(0.08)	15.0	(0.0)	25.4
CRL2688	$^{12}\text{CO}(1-0)$	274.	(1.6)	19.6	(0.8)	-33.8
	$^{12}\text{CO}(2-1)$	185.	(1.7)	17.9	(2.3)	-36.0
	$^{13}\text{CO}(1-0)$	36.5	(0.34)	17.5	(0.8)	-34.9
	$^{13}\text{CO}(2-1)$	78.0	(0.68)	15.9	(0.6)	-35.4
	$\text{C}^{18}\text{O}(1-0)$	3.54	(0.22)	17.1	(1.5)	-36.1
	$\text{C}^{18}\text{O}(2-1)$	9.00	(0.20)	15.9	(1.1)	-35.0
	$\text{C}^{17}\text{O}(1-0)$	3.84	(0.22)	17.4	(1.3)	-32.4
	$\text{C}^{17}\text{O}(2-1)$	12.1	(0.21)	16.2	(0.9)	-36.7
CRL618	$^{12}\text{CO}(1-0)$	213.	(0.7)	19.8	(2.2)	-21.0
	$^{12}\text{CO}(2-1)$	161.	(0.9)	18.5	(1.7)	-21.4
	$^{13}\text{CO}(1-0)$	12.4	(0.50)	17.9	(3.2)	-21.2
	$^{13}\text{CO}(2-1)$	47.8	(0.39)	15.8	(0.5)	-21.4
	$\text{C}^{18}\text{O}(1-0)$	0.988	(0.223)	15.8	(0.0)	-21.4
	$\text{C}^{18}\text{O}(2-1)$	2.58	(0.91)	15.8	(0.0)	-21.4
	$\text{C}^{17}\text{O}(1-0)$	1.54	(0.17)	15.8	(0.0)	-21.4
	$\text{C}^{17}\text{O}(2-1)$	5.62	(0.73)	16.3	(1.7)	-22.0

Table IV.7 (suite)

Enveloppe	Molécule	$\int T_{mb} dv$ (K.km/s)	(σ)	V_{exp} (km/s)	(σ)	V_{LSR} (km/s)
IRC10216	$^{12}\text{CO}(1-0)$	404.	(1.5)	14.3	(0.4)	-26.2
	$^{12}\text{CO}(2-1)$	977.	(3.8)	14.7	(0.3)	-25.8
	$^{13}\text{CO}(1-0)$	46.7	(0.51)	14.9	(0.4)	-26.4
	$^{13}\text{CO}(2-1)$	85.3	(0.88)	14.3	(0.3)	-26.7
	$\text{C}^{18}\text{O}(1-0)$	1.52	(0.16)	14.5	(0.0)	-26.5
	U	1.98	(0.16)	13.2	(2.4)	
	$\text{C}^{18}\text{O}(2-1)$					
	$\text{C}^{17}\text{O}(1-0)$	2.67	(0.24)	14.5	(0.0)	-26.5
	$^{30}\text{SiCC}$	1.71	(0.25)	14.5	(0.0)	-26.5
	$\text{C}^{17}\text{O}(2-1)$	5.92	(0.73)	14.5	(0.3)	-26.7
CIT6	$^{13}\text{CO}(1-0)$	8.50	(0.21)	17.1	(0.6)	-0.5
	$^{13}\text{CO}(2-1)$	14.8	(0.26)	16.4	(0.3)	-1.2
	$\text{C}^{18}\text{O}(1-0)$	< 0.296 ⁽¹⁾				
	$\text{C}^{18}\text{O}(2-1)$	< 0.279 ⁽¹⁾				
	$\text{C}^{17}\text{O}(1-0)$	0.760	(0.138)	16.4	(0.0)	-1.2
	$^{30}\text{SiCC}$			16.4	(0.0)	-1.2
	$\text{C}^{17}\text{O}(2-1)$	1.14	(0.20)	16.4	(0.0)	-1.2

(1) Limite de détection à 3 σ

2. Détermination des rapports isotopiques

La méthode employée est la même que celle que nous avons utilisée pour déterminer les rapports isotopiques dans IRC+10216 ou dans les étoiles de type J : les rapports des températures de brillance intégrées des raies optiquement minces, corrigés du facteur en v , dû aux forces de raies fournissent une estimation du rapport d'abondance des molécules. La taille des enveloppes (et leur forme, dans le cas des nébuleuses planétaires, qui présentent souvent des écarts importants à la symétrie sphérique) n'étant pas connue avec précision, nous nous sommes contentés, pour corriger des effets de dilution dans le lobe les températures de brillance dans le lobe principal, reportées dans la **Table IV.7**, de deux

hypothèses extrêmes : celle d'une enveloppe totalement résolue (cas de NGC7027, IRC+10216, CIT6; pas de facteur correctif) et celle d'une enveloppe ponctuelle (cas de CRL618; facteur correctif inversement proportionnel au carré de la fréquence). Dans le cas de CRL2688, dont la résolution est imparfaite, nous avons calculé les rapports d'abondance en faisant les deux hypothèses et l'on peut constater (voir la **Table IV.7**) que les écarts entre les deux séries de valeurs sont faibles. Comme nous l'avons signalé plus haut, les raies de l'isotope principal ^{12}CO sont optiquement épaisses dans les cinq enveloppes, si bien qu'elles ne peuvent pas être utilisées pour déterminer les rapports isotopiques $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ et $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$. En revanche, les raies de l'isotope ^{13}CO sont plus optiquement minces, si bien que nous utiliserons les doubles rapports d'abondances $^{13}\text{CO}/\text{C}^{18}\text{O}$ et $^{13}\text{CO}/\text{C}^{17}\text{O}$, ainsi que les rapports d'abondance $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$, déterminés par ailleurs, pour estimer les rapports isotopiques de l'oxygène. Les rapports d'abondance déduits des rapports d'intensité intégrées des transitions (1-0) et (2-1) des isotopes rares de CO sont reportés dans la **Table IV.8**. Les incertitudes sur les rapports incluent les incertitudes sur les intensités intégrées dues à l'ajustement de profils modèles, qui sont données dans la **Table IV.7**, ainsi qu'une incertitude de 10% sur la calibration des raies; elles ont été calculées en utilisant la méthode décrite pour les rapports isotopiques des étoiles de type J.

Table IV.8 : Rapports d'abondances des isotopes de CO

Enveloppe	Transition	$^{13}\text{CO}/\text{C}^{18}\text{O}$	$^{13}\text{CO}/\text{C}^{17}\text{O}$	$\text{C}^{17}\text{O}/\text{C}^{18}\text{O}$
NGC7027	(1-0)	13.0 (+4.7,-3.2)	8.6 (+2.9,-2.0)	1.50 (+0.66,-0.45)
	(2-1)	17.1 (+4.4,-3.4)	10.2 (+2.4,-1.9)	1.67 (+0.44,-0.35)
CRL618	(1-0)	12.4 (+5.8,-3.5)	8.5 (+2.6,-1.9)	1.45 (+0.76,-0.46)
	(2-1)	18.3 (+13.5,-6.3)	9.0 (+2.1,-1.7)	2.0 (+1.5,-0.70)
CRL2688	(1-0) ⁽¹⁾	10.3 (+2.5,-2.0)	9.7 (+2.4,-1.9)	1.06 (+0.28,-0.22)
	(1-0) ⁽²⁾	10.2 (+2.5,-2.0)	10.1 (+2.5,-1.9)	1.01 (+0.27,-0.21)
	(2-1) ⁽¹⁾	8.6 (+1.9,-1.6)	6.6 (+1.5,-1.2)	1.31 (+0.30,-0.24)
	(2-1) ⁽²⁾	8.6 (+1.9,-1.6)	6.8 (+1.5,-1.2)	1.25 (+0.28,-0.23)
IRC+10216	(1-0)	30.5 (+8.7,-6.5)	17.8 (+4.9,-3.7)	1.71 (+0.55,-0.42)
	(2-1)		14.7 (+4.5,-3.2)	
CIT6	(1-0)	> 29	11.4 (+4.5,-2.9)	> 2.5
	(2-1)	> 53	13.3 (+4.9,-3.3)	> 4.0

(1) Rapports calculés en supposant l'enveloppe totalement résolue.

(2) Rapports calculés en supposant l'enveloppe ponctuelle.

Les rapports d'abondances déduits des transitions (1-0) présentent des incertitudes un peu plus grandes que ceux déduits des rapports (2-1), mais les deux séries de mesures donnent des valeurs en bon accord les unes avec les autres. On peut remarquer, en particulier, que les rapports isotopiques faisant intervenir $C^{17}O$ ne montrent aucune différence systématique entre les valeurs obtenues à partir de la transition (1-0) et la transition (2-1), alors que la structure hyperfine de la transition (1-0) (composantes extrêmes distantes de 1.3 MHz) est moins négligeable par rapport à la largeur de la raie (13 MHz) que celle de la transition (2-1) (composantes distantes de 1.4 MHz pour une largeur de raie de 25 MHz); l'effet de cette structure hyperfine sur la détermination des rapports d'abondances est très probablement, comme nous l'avons déjà indiqué, tout-à-fait négligeable devant les autres incertitudes qui affectent ces rapports.

(On peut tout de même noter que dans l'enveloppe CRL2688, les transitions (2-1) conduisent à des valeurs légèrement plus faibles des rapports $^{13}CO/C^{18}O$ et $^{13}CO/C^{17}O$, que les transitions (1-0), ce qui traduit probablement que les raies (2-1) de ^{13}CO sont plus optiquement épaisses que les raies (1-0), ainsi que l'on observe dans le cas de l'isotope principal ^{12}CO)

Le calcul des rapports isotopiques $^{16}O/^{18}O$ et $^{16}O/^{17}O$, à partir des doubles rapports d'abondances, nécessite la connaissance des rapports isotopiques $^{12}C/^{13}C$. Pour IRC+10216, nous avons pris comme rapport isotopique du carbone, la valeur 47 que nous avons déterminée précédemment. Dans le cas de NGC7027, les intensités intégrées des transitions (1-0) et (2-1) de ^{12}CO et ^{13}CO , fournissent, en utilisant la relation IV.3, des rapports d'abondance de 47 et de 13 respectivement. La première valeur apparaît moins affectée par l'opacité des raies, mais représente tout de même certainement une limite inférieure du rapport isotopique $^{12}C/^{13}C$ car les raies de l'isotope principal sont très optiquement épaisses. En l'absence de modélisation nous permettant de corriger cette valeur des effets d'opacité des raies, nous adopterons un rapport isotopique $^{12}C/^{13}C$ de 47 dans NGC7027 (il est assez peu probable que cette valeur sous-estime d'un facteur beaucoup plus grand que 2 le rapport isotopique véritable, mais il faut cependant souligner que dans le cas de la nébuleuse planétaire IRAS 21282+5050, observée par Likkell *et al.*, (1988), le rapport d'abondance $^{12}CO/^{13}CO$ est au moins égal à 200). De même, les intensités intégrées des transitions (1-0) de ^{12}CO et de ^{13}CO dans CRL618 fournissent, en supposant la source ponctuelle, un rapport d'abondance de 15, qui représente très certainement une limite inférieure au rapport isotopique, et que nous préférons à la valeur 11.6 calculée par Wannier et Sahai en modélisant l'émission des transitions (2-1), probablement encore beaucoup plus affectées par des effets d'opacité, (nos observations fournissent, pour ces raies, un rapport

d'intensités intégrées de 2.9 !). Pour CRL2688 et CIT6, nous avons pris les valeurs déterminées par Wannier et Sahai (1987) à partir d'une modélisation des émissions de ^{12}CO et ^{13}CO dans ces enveloppes et qui représentent vraisemblablement, elles aussi, en particulier dans le cas de CRL2688, des limites inférieures du rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$.

Outre les problèmes d'opacité des raies, que nous discutons ci-dessous, étoile par étoile, le fractionnement chimique et la photodissociation sélective des isotopes de CO sont susceptibles d'affecter les abondances relatives des molécules et de biaiser les rapports isotopiques que l'on en tire. Le fractionnement chimique n'affecte que les abondances relatives de ^{12}CO et de ^{13}CO (Langer *et al*, 1984) et conduit à une surabondance de ^{13}CO au détriment de ^{12}CO . Cependant, cet effet n'est pas susceptible de biaiser les rapports isotopiques $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ et $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$, car la surestimation des rapports isotopiques $(^{16}\text{O}/^{18}\text{O})(^{13}\text{C}/^{12}\text{C})$, avec ($i=17,18$), évalués à partir des rapports d'abondances moléculaires $^{13}\text{CO}/\text{C}^{18}\text{O}$ est juste compensée par la sous-estimation du rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ évalué à partir du rapport $^{12}\text{CO}/^{13}\text{CO}$.

La photodissociation des molécules, par le rayonnement UV interstellaire, a pour effet de limiter l'extension spatiale des isotopes de CO, et ce d'autant plus, qu'ils sont moins abondants, et donc moins "auto-écrantés" de ce rayonnement. Elle conduirait donc à sous estimer l'abondance relative des isotopes les plus rares. Cependant, il est assez probable que cet effet n'affecte que peu les abondances déduites d'observations en direction du centre d'enveloppes résolues, c'est à dire portant sur des couches de gaz protégées du rayonnement UV interstellaire.

Les valeurs moyennes, pondérées en $1/\sigma^2$, des rapports isotopiques de l'oxygène dans les cinq enveloppes sont indiquées dans la **Table IV.9**; nous y avons également fait figurer les valeurs des rapports isotopiques $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ que nous avons utilisées pour calculer les rapports isotopiques $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ et $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$, à partir des doubles rapports isotopiques.

Table IV.9 : Rapports isotopiques de l'oxygène

Enveloppe	$^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$	$^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$	$^{17}\text{O}/^{18}\text{O}$	$^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$
NGC7027	720 (+150,-110)	450 (+90,-65)	1.61 (+0.36,-0.27)	47 ⁽¹⁾
CRL618	202 (+76,-42)	132 (+24,-20)	1.58 (+0.66,-0.36)	15 ⁽¹⁾
CRL2688	184 (+30,-24)	152 (+24,-20)	1.14 (+0.20,-0.16)	20 ⁽²⁾
IRC+10216	1430 (+410,-305)	760 (+155,-110)	1.71 (+0.55,-0.42)	47 ⁽³⁾
CIT6	> 1000	320 (+85,-57)	> 3.25	26 ⁽²⁾

(1) Calculé par nous

(2) Calculé par Wannier et Sahai (1987)

(3) Calculé par Kahane et al (1988a)

Pour NGC7027, le rapport isotopique $^{17}\text{O}/^{18}\text{O}$ n'est certainement pas faussé par l'opacité des raies, car celles-ci sont optiquement minces. En revanche, les rapports $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ et $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$ peuvent être sous-estimés pour deux raisons : les formes des raies de ^{13}CO laissent penser que celles-ci ne sont pas optiquement minces, si bien que les doubles rapports d'abondances peuvent être sous-estimés, d'autre part, la valeur du rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ que nous avons adoptée est probablement, elle-aussi, une limite inférieure de la vraie valeur.

Pour CRL2688, la valeur du rapport $^{17}\text{O}/^{18}\text{O}$, n'est, bien sûr, pas affectée par l'opacité des raies, mais nous pouvons faire les mêmes restrictions que dans le cas de NGC7027, sur les valeurs des rapports isotopiques $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ et $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$, qui impliquent l'isotope principal de l'oxygène : elles sont probablement sous-estimées en raison de l'opacité des raies de ^{13}CO et de ^{12}CO . Les valeurs que nous déterminons sont d'ailleurs plus faibles que celles calculées par Wannier et Sahai, à partir d'une modélisation de l'émission des raies des isotopes de CO. Cependant, l'opacité des raies ne suffit pas à expliquer la différence d'un facteur 2, entre nos valeurs et les leurs, car les rapports d'intensités intégrées donnés par Wannier et Sahai sont eux-mêmes un facteur 1.5 supérieurs aux nôtres. Il est peu probable que les intensités intégrées que nous indiquons soient gravement faussées par des problèmes de calibration des raies, car les transitions (1-0) et (2-1) fournissent des résultats cohérents (en outre, même si nous ne tenons compte que des rapports isotopiques fournis par les transitions (1-0), plus optiquement minces, nos valeurs demeurent notablement plus faibles que celles indiquées par Wannier et Sahai). Il paraît plus

vraisemblable que les intensités intégrées des raies des isotopes rares observées par Wannier et Sahai présentent des incertitudes suffisamment importantes pour expliquer cette différence (la raie $C^{17}O(2-1)$ est très bruyante et la raie $C^{18}O(2-1)$ est à peine détectée, voir la figure 2j de Wannier et Sahai, 1987).

Pour CRL618, nous avons pu déduire de la forme des raies des isotopes de CO, qu'elles étaient optiquement minces; en revanche, il est possible que le rapport $^{12}C/^{13}C$, déterminé à l'aide de la raie (1-0), soit un peu sous-estimé (encore que nous ayons adopté une valeur un peu supérieure au rapport isotopique calculé par Wannier et Sahai à l'aide d'une modélisation qui tient compte de l'opacité des raies). Le rapport isotopique $^{16}O/^{17}O$, que nous déterminons, est en bon accord avec la valeur fournie par Wannier et Sahai (ramenée au même rapport isotopique du carbone).

Pour IRC+10216, les valeurs des rapports isotopiques ne sont probablement pas faussées par des effets d'opacité des raies car ils s'appuient sur l'observation de raies optiquement minces. Le rapport $^{16}O/^{18}O$ est en accord avec les valeurs déterminées par Wannier et Sahai à partir des transitions (1-0) et (2-1) des isotopes de CO. Il y a également concordance entre nos mesures des rapports isotopiques $^{16}O/^{17}O$ et $^{17}O/^{18}O$, et les valeurs déduites par Wannier et Sahai des observations (1-0) (que nous avons recalculées en incluant la correction d'intensité intégrée de la raie de $C^{18}O(1-0)$ effectuée récemment par Sahai (1989), afin de tenir compte du recouvrement partiel de cette raie par celle de $^{30}SiCC$). En revanche, les rapports isotopiques déduits par Wannier et Sahai à l'aide de la raie (2-1) de $C^{17}O$, diffèrent d'un facteur 2.5 de ceux que nous calculons. Nous n'avons pas d'interprétation de cette différence, si ce n'est que la raie de $C^{17}O(2-1)$ observée par Wannier et Sahai, présente une forme disymétrique, très différente du profil en U attendu (voir la Figure 2c de Wannier et Sahai, 1987), ce qui aurait pu conduire ces auteurs à sous-estimer l'intensité intégrée de la raie.

Pour CIT6, nos observations n'ont pas permis d'autres déterminations que celle du rapport isotopique $^{16}O/^{17}O$. En ce qui concerne les autres rapports isotopiques, nous ne pouvons fournir que des limites inférieures à leur valeur car les raies de $C^{18}O$ n'ont pas été détectées.

D. Comparaison avec les rapports isotopiques mesurés en IR

1. Le rapport $^{17}\text{O}/^{18}\text{O}$

Les observations infrarouges et radio des enveloppes des géantes rouges indiquent toutes un enrichissement important en ^{17}O par rapport à ^{18}O , d'un facteur allant de 2 à 15 dans les cas les plus extrêmes. Nous avons reporté dans la **Figure IV.12** les résultats des mesures IR effectuées dans plusieurs types de Géantes Rouges, ainsi que les valeurs que nous déterminons à partir des observations radio de cinq enveloppes évoluées. Dans chaque catégorie d'objets, la dispersion des mesures est importante, mais il n'apparaît pas de différences de comportement systématiques du rapport isotopique dans les 4 classes d'enveloppes, qui correspondent, selon les modèles généralement admis, à des stades d'évolution de plus en plus avancés : les étoiles K et M reportées ici sont dans la phase de combustion de la couche d'hydrogène, les étoiles MS, S et C se situent de plus en plus loin le long de la branche AGB et les étoiles que nous avons observées vont bientôt quitter ou viennent de quitter la branche AGB, pour se transformer en nébuleuses planétaires.

Ce résultat est en accord avec les modèles théoriques, (voir les rappels du chapitre 3), qui prédisent que la première phase de mélange enrichit fortement la surface de l'étoile en ^{17}O , produit du cycle CNO, sans modification très importante de l'abondance de ^{18}O . Cet enrichissement dépend largement de la masse de l'étoile, si bien qu'il conduit à une dispersion importante des rapports isotopiques $^{17}\text{O}/^{18}\text{O}$ à la surface de l'étoile, à l'issue de la première phase de mélange. Les modèles ne prévoient pas de modifications ultérieures de ce rapport isotopique au cours de la phase AGB.

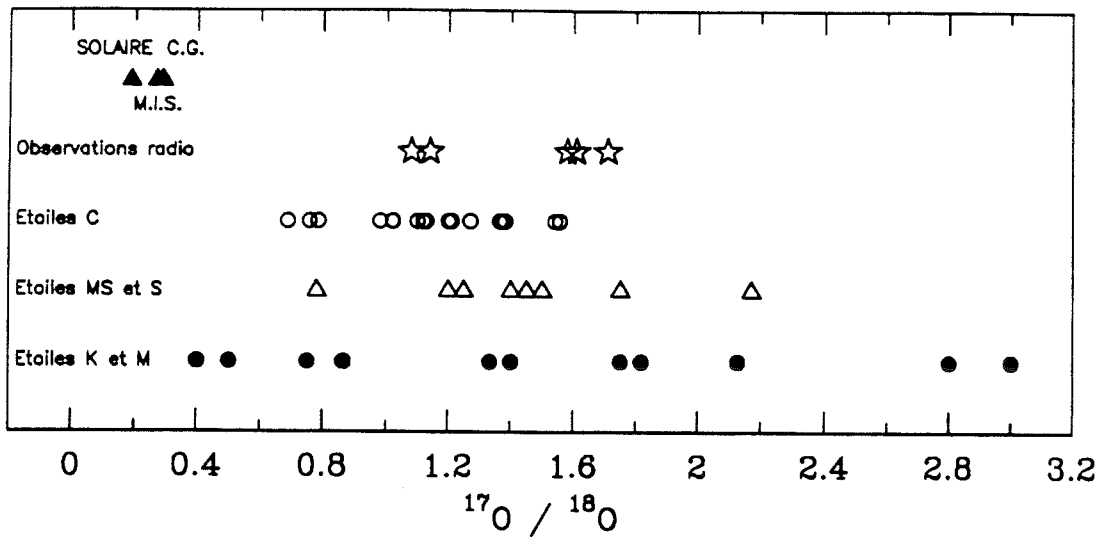


Figure IV.12 : Rapports isotopiques $^{17}\text{O}/^{18}\text{O}$ mesurés dans divers types de Géantes Rouges. Les mesures IR dans les étoiles K et M ont été effectuées par Harris et Lambert (1984) et Harris et al (1988), celles des étoiles MS et S par Harris et al (1985) et celles des étoiles C par Harris et al, 1987.

2. Les rapports $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$ et $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$

Selon les modèles d'évolution des Géantes Rouges, la seconde phase de mélange, (qui ne se produit que pour les étoiles les plus massives), et surtout, la troisième phase de mélange, (phase AGB), vont encore enrichir la matière circumstellaire en ^{17}O , jusqu'à atteindre des rapports isotopiques $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$ de l'ordre de 300. En ce qui concerne ^{18}O , selon que la séquence de destruction de ^{14}N , qui se produit lors de la phase de combustion de He, se poursuit jusqu'à la formation de ^{18}O ou s'interrompt avant, les rapports isotopiques $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ prédits par les modèles sont voisins de 100 ou de l'ordre de 600 à 700.

Nous avons reporté dans la **Figure IV.13** les points figuratifs de ces rapports isotopiques de l'oxygène mesurés dans différents types de Géantes Rouges, ainsi que les rapports solaires et ceux mesurés dans le milieu interstellaire. Alors que les étoiles K et M, qui n'ont subi que la première phase de mélange, présentent des rapports isotopiques en accord raisonnable avec les prédictions théoriques (peu de modifications de l'abondance de ^{18}O , très fort enrichissement en ^{17}O), les étoiles MS, S et C montrent des sous-abondances en ^{17}O et ^{18}O , qui peuvent être considérables, par rapports aux valeurs que fournissent les modèles.

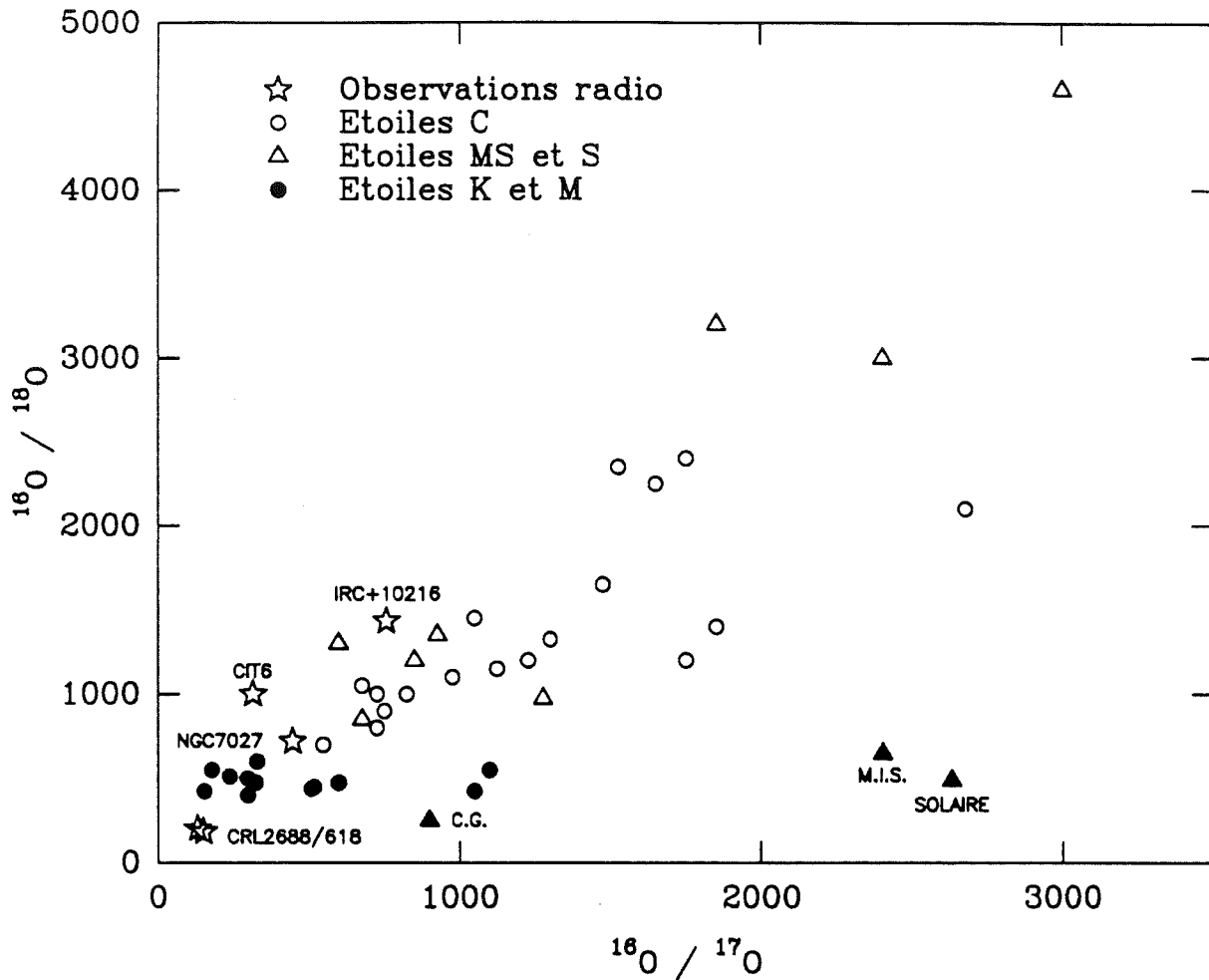


Figure IV.13 : Rapports isotopiques $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$ et $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$, mesurés dans divers types de Géantes Rouges. Les mesures IR dans les étoiles K et M ont été effectuées par Harris et Lambert (1984) et Harris et al (1988), celles des étoiles MS et S par Harris et al (1985) et celles des étoiles C par Harris et al, 1987.

Différentes explications ont été successivement examinées et confrontées aux observations par Harris, Lambert et leurs collaborateurs (Harris *et al*, 1985, 1987, 1988). A l'heure actuelle, la seule interprétation qui semble demeurer compatible avec les observations est celle de la dilution, lors de la phase AGB, des surabondances en ^{17}O et ^{18}O , acquises lors des phases antérieures, par l'apport à la surface de l'étoile de matière pauvre en ^{17}O et ^{18}O , en provenance de la couche de combustion de He, grâce aux mouvements convectifs qui accompagnent les pulsations thermiques. Cette explication reste cependant uniquement qualitative car les modèles actuels de mélange lors de la phase AGB ne prédisent pas des apports de matière à la surface de l'étoile, suffisants pour conduire aux dilutions observées.

Nos observations, qui concernent des étoiles qui se trouvent à un stade évolutif plus avancé que celles observées en IR (fin de la phase AGB, pre et jeune nébuleuses planétaires), soulèvent un nouveau problème : elles indiquent des abondances en ^{17}O et en ^{18}O nettement plus élevées que celles des étoiles MS, S et C, et même, dans le cas de CRL618 et CRL2688, plus élevées que celles des étoiles K et M. On peut également remarquer que le point figuratif de CIT6, qui correspond à une limite inférieure du rapport $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ se trouverait déplacé très en dehors du domaine occupé par les points figuratifs des autres étoiles, s'il s'avérait que ^{18}O est beaucoup moins abondant que la limite que nous indiquons.

Un premier élément de réponse est apporté par les incertitudes sur la détermination du rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans ces enveloppes, qui peuvent conduire, comme nous l'avons indiqué plus haut, à sous-estimer les rapports $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$ et $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ (on remarquera qu'IRC+10216, dont le rapport isotopique du carbone est bien déterminé, présente des rapports plus élevés). Cependant, même en supposant pour le rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$, une valeur déjà assez peu probable de 100, les rapports isotopiques de l'oxygène, $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ et $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$, n'atteindraient respectivement que 1500 et 950 pour NGC7027, 1350 et 880 pour CRL618 et 920 et 760 pour CRL2688, si bien que les points figuratifs correspondant resteraient dans un domaine de faibles rapports isotopiques.

Il est difficile de formuler des interprétations précises de cette localisation particulière des points figuratifs de géantes rouges très évoluées, en l'absence d'explication quantitativement satisfaisante des rapports isotopiques de l'oxygène à la surface des étoiles dans la phase AGB, et en particulier de la dispersion des valeurs observées : traduit-elle un effet évolutif (la diminution des abondances relatives des isotopes rares de l'oxygène est d'autant plus grande que l'étoile est plus évoluée) ou l'influence de la masse de l'étoile sur l'efficacité de la dilution de ces abondances (le nombre de "pulsations thermiques" lors de la phase AGB dépend de la masse de l'étoile et chaque pulsation est accompagnée de mouvements convectifs qui apportent de la matière plus riche en ^{16}O à la surface de l'étoile) ? Compte-tenu de ces incertitudes, nous nous contenterons d'examiner brièvement 2 hypothèses.

1. Etant donné que nous comparons des rapports isotopiques mesurés à l'aide d'observations radio, à des rapports déterminés à partir d'observations infrarouges, on peut imaginer que la comparaison est faussée par le fait que les deux types d'observations n'échantillonnent pas la même région de l'enveloppe et correspondent donc à des couches de gaz d'âges différents. En suivant le raisonnement que nous avons fait à propos du rapport

isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ dans les étoiles de type J, on pourrait avancer l'idée que nos observations radio montrent des dilutions relativement modestes, car le gaz échantillonné aurait été éjecté à un stade précoce le long de la branche AGB, alors que le gaz de la surface de l'étoile n'aurait pas encore subi de dilution importante. Cependant, contrairement au cas des enveloppes de type J que nous avons examiné précédemment, les données IR et radio portent ici sur des étoiles différentes, ce qui rend la comparaison entre les deux séries de mesures très difficile (d'autant que la dispersion des valeurs obtenues, par une méthode unique, à l'intérieur d'une catégorie donnée d'étoiles, est importante). En outre, ni les observations IR, ni les observations radio ne semblent indiquer de corrélation entre les valeurs des rapports isotopiques et l'état d'évolution des étoiles : les étoiles MS et S fournissent des rapports au moins aussi grands que les étoiles C, plus évoluées; les pré-nébuleuses planétaires CRL2688 et CRL618 présentent des rapports plus faibles que IRC+10216, qui est probablement encore sur la branche AGB. (Notons que selon Willems et de Jong (1988), les étoiles S correspondent à une phase d'évolution parallèle et non antérieure à celles des étoiles C, ce qui nuancerait un peu cet argument, mais, quoi qu'il en soit, les données radio et IR actuelles ne permettent guère de discuter sérieusement cette explication "évolutive" des rapports isotopiques mesurés en radio).

2. Alternativement, si la dispersion des rapports isotopiques mesurés en IR ne correspond pas à un effet d'évolution le long de la branche AGB, il est vraisemblable qu'elle est liée à la variété des propriétés des étoiles, et en premier lieu, leur masse. Il est alors fort possible, que les faibles rapports isotopiques $^{16}\text{O}/^{17}\text{O}$ et $^{16}\text{O}/^{18}\text{O}$ observés en radio, qui ne sont pas incompatibles avec les rapports extrêmes mesurés dans les étoiles MS, S et C (au moins si l'on suppose que le rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ a été assez sérieusement sous-estimé dans CRL618 et CRL2699) traduisent, simplement, un effet de sélection d'une catégorie particulière d'étoiles, celles qui sont amenées à présenter des taux de pertes de masse très importants.

Etant donné le petit nombre de mesures effectué et les incertitudes encore importantes qui les entachent, il ne paraît guère possible d'avancer plus loin dans la voie de l'interprétation des rapports isotopiques de l'oxygène mesurés à l'aide d'observations radio dans des enveloppes très évoluées. Nous suggérons en revanche de préciser et d'étendre ces mesures par

- la détermination de l'abondance de ^{18}O dans CIT6
- une nouvelle mesure du rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ (si possible à l'aide de transitions optiquement minces) dans NGC7027, CIT6 et surtout CRL2688 et CRL618.

- la mesure des rapports isotopiques de l'oxygène dans quelques enveloppes déjà observées en IR, afin de comparer les deux séries de mesures et de détecter d'éventuels effets d'évolution temporelle des rapports isotopiques.

- la mesure des rapports isotopiques de l'oxygène (et donc aussi du carbone) dans un plus grand nombre d'enveloppes d'étoiles évoluées, trop opaques pour être accessibles aux observations IR, et, en particulier, dans la nébuleuse planétaire IRAS 21282+5050, qui présente, comme nous l'avons signalé plus haut, un rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ très élevé.

Conclusions et perspectives

La première partie du travail que nous avons exposé ici était essentiellement consacrée à la recherche de nouvelles molécules interstellaires. Par définition, une telle étude ne peut guère être considérée comme achevée, aussi plutôt qu'une conclusion, nous tirerons un rapide bilan des nouvelles découvertes que nous avons effectuées et nous indiquerons les axes des recherches à court et moyen termes, que nous envisageons dans ce domaine.

Le premier objectif que nous nous étions fixé, la détection, grâce au radiotélescope de 30m de l'IRAM, des chaînes carbonées C_5H et C_6H , a bien sûr été atteint, ce qui porte à six le nombre de membres de la famille C_nH connus et devrait permettre, grâce à la mesure de leurs abondances relatives, de mieux comprendre les mécanismes de formation des longues chaînes carbonées, qui sont une des caractéristiques du milieu interstellaire. Nous avons également détecté et identifié les raies des isotopes ^{29}Si et ^{30}Si de la première molécule cyclique découverte dans l'espace interstellaire, SiCC, et confirmé ainsi, définitivement, son identification. Ces recherches, qui nous ont amené à couvrir de larges fractions du spectre de l'enveloppe IRC+10216 à 2mm et 3mm, ont conduit à la découverte de dizaines de nouvelles transitions moléculaires. Parmi elles, six doublets ont été attribués à une molécule, dont l'identification demande à être confirmée, et qui pourrait être HSiCC. Au total, la recherche de nouvelles espèces nous a conduit à l'observation d'environ 400 transitions moléculaires dans l'enveloppe IRC+10216, qui nous ont permis de déterminer les densités projetées et les températures rotationnelles d'une trentaine de molécules et de leurs substitués isotopiques rares, apportant de nouvelles informations sur les conditions d'excitation et les abondances moléculaires dans cette enveloppe. Notons, en particulier, que les modèles de chimie de l'enveloppe auront désormais à prendre en compte les molécules soufrées qui, par suite de la détection de deux nouvelles espèces, C_2S et C_3S , se sont avérées plus abondantes et plus diverses, que ce que les seules détections de CS et SiS pouvaient laisser croire.

La grande majorité des raies détectées, à 2mm et 3mm, dans cette enveloppe circumstellaire, est désormais identifiée et il est probable qu'une fraction importante des 80 raies encore inconnues, (et pour la plupart très faibles), appartient à des états vibrationnels excités ou à des isotopes rares d'espèces déjà identifiées. A plus haute fréquence, la couverture spectrale d'IRC+10216 est encore très réduite et très morcelée, mais il apparaît déjà que, bien que la densité des raies soit beaucoup plus faible qu'à 2 et 3mm, le nombre de

raies fortes encore inconnues à 1mm est important. Il est vraisemblable qu'une observation un peu plus systématique de l'émission à 1mm des régions assez internes de l'enveloppe, que permet le lobe de 12" de l'antenne du 30m de l'IRAM aux fréquences voisines de 200 GHz, conduira encore à la détection de nouvelles molécules circumstellaires. En outre, la mesure des intensités de raies dans ce domaine de fréquences donnera accès aux populations de niveaux rotationnels relativement élevés et permettra de compléter l'étude des conditions d'excitation moléculaire dans l'enveloppe, commencée à plus basse fréquence.

La recherche de molécules dans d'autres enveloppes circumstellaires est, jusqu'alors, restée très limitée, en raison de la relative faiblesse, attendue sinon observée, de l'émission moléculaire de ces objets. Elle a cependant déjà donné lieu à d'importantes détections (celle de l'ion HCO^+ par exemple, voir Morris *et al*, 1987) et mis en évidence des variations d'abondances relatives et de conditions d'excitation moléculaire spectaculaires (voir par exemple Bujarrabal *et al*, 1988). Les enveloppes oxygénées, en particulier, dont la chimie était encore récemment considérée comme beaucoup plus pauvre que celle des enveloppes carbonées, devraient donner lieu, dans les prochaines années, à des découvertes importantes.

Les travaux de recherche de nouvelles molécules que nous avons exposés ici, ne se sont pas limités à l'enveloppe circumstellaire IRC+10216. Trois nouvelles espèces, deux isotopes et un isomère de molécules déjà identifiées, ont été découvertes dans le nuage moléculaire SgrB2, proche du centre galactique. Ces observations, ainsi que la "mini couverture spectrale" du nuage moléculaire Orion A que nous avons effectuée avec le 30m de l'IRAM également, ont mis en évidence l'extrême richesse des spectres moléculaires de ces régions, qui rend pratiquement impossible un travail d'identification systématique des raies détectées. En revanche, les observations réalisées devraient permettre, d'une part la recherche de quelques molécules bien choisies (en particulier, bien sûr, des molécules biologiques, comme les acides aminés), et d'autre part, par l'étude des intensités des raies, la détermination des abondances et des températures d'excitation des espèces moléculaires déjà connues.

Un nuage moléculaire aux caractéristiques très différentes, le nuage sombre TMC1, est lui aussi une source privilégiée de nouvelles molécules. En raison de l'étroitesse et de la relative faiblesse des raies moléculaires émises par ce nuage, son étude systématique avec le radiotélescope de 30m de l'IRAM est actuellement impossible. Cependant, le développement de détecteurs spectraux à haute résolution (de type autocorrélateurs ou

acousto-optiques) et la poursuite de l'amélioration des performances des récepteurs millimétriques devraient permettre d'envisager une telle étude d'ici quelques années.

Lors de l'exploitation des données fournies par la couverture spectrale de l'enveloppe IRC+10216, nous avons mentionné un travail en cours, de cartographie de l'émission de l'enveloppe dans diverses transitions moléculaires. Cette étude, actuellement menée avec le 30m de l'IRAM, mais qui devrait se développer pleinement à la mise en service de l'interféromètre de l'IRAM, sur le Plateau de Bure, s'accompagnera d'une modélisation des conditions d'excitation dans l'enveloppe, et devrait permettre de déterminer la répartition spatiale d'un certain nombre de molécules-clés et de tester ainsi les prédictions, en ce domaine, des modèles de chimie circumstellaire.

La seconde partie de ce mémoire a été consacrée à la détermination d'abondances isotopiques dans des enveloppes circumstellaires. Nous avons souligné que ces abondances constituent une mesure très directe de l'enrichissement, via plusieurs processus de mélange, du gaz de la surface de l'étoile, en produits des réactions de nucléosynthèse qui se déroulent au cœur ou dans des couches profondes de celle-ci. Nous résumons ici les principales conclusions auxquelles nos mesures nous ont fait aboutir, ainsi que les perspectives de travail que nous envisageons dans ce domaine.

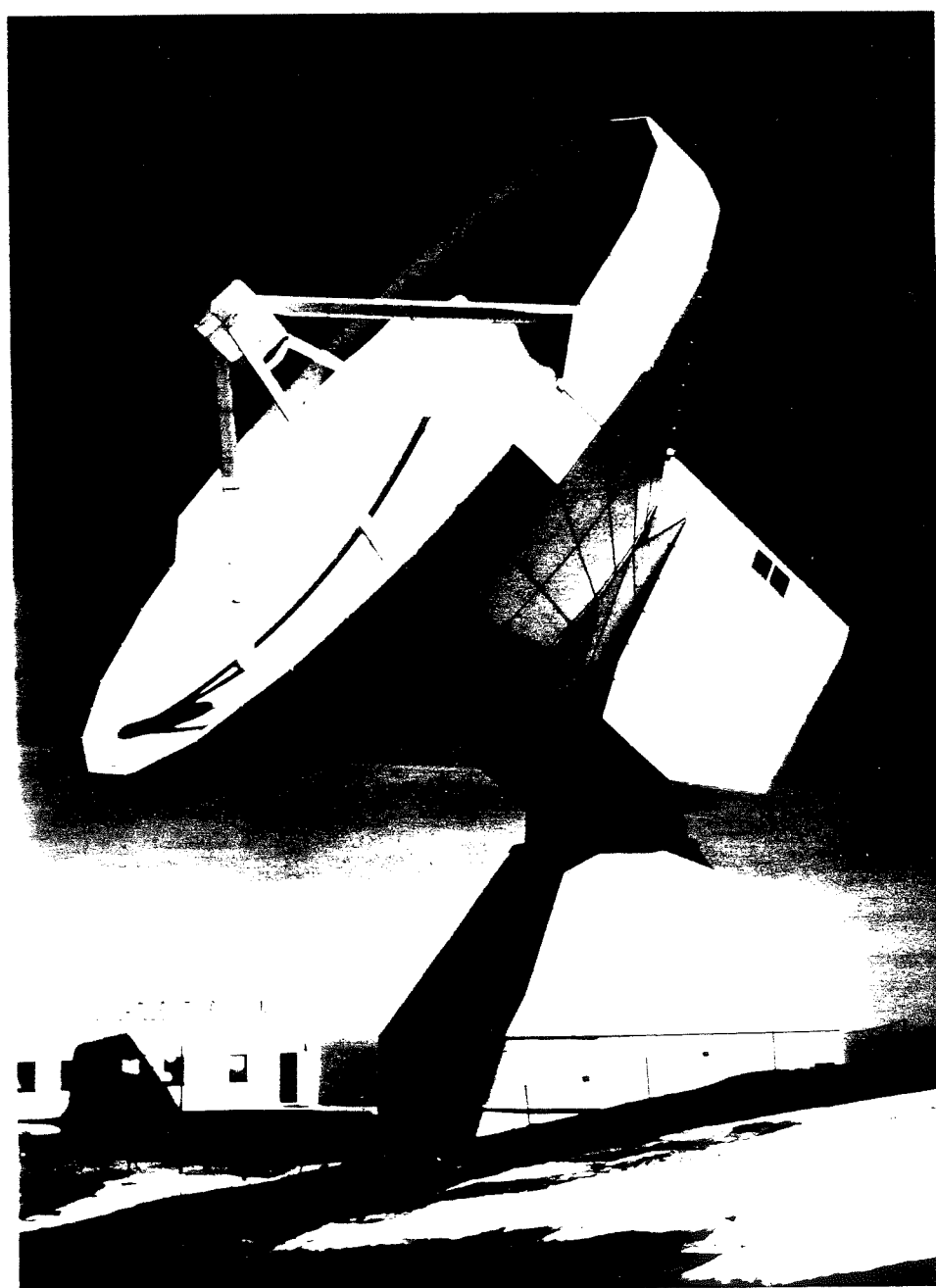
La mesure des rapports isotopiques du carbone, de l'azote, du soufre et du silicium dans l'enveloppe IRC+10216, est fondée sur l'observation, avec le radiotélescope de 30m de l'IRAM, de raies moléculaires optiquement minces, afin de réduire le recours à la modélisation de l'émission de l'enveloppe et de minimiser les incertitudes qui peuvent entacher la détermination d'abondances moléculaires à partir de l'intensité des raies rotationnelles. La mesure du rapport isotopique du carbone, en particulier, représente la première détermination non biaisée par l'opacité des raies de l'isotope principal, réalisée dans cette enveloppe. Les valeurs obtenues confirment les prédictions des modèles théoriques : dans les étoiles de type géantes rouges, la combustion de l'hydrogène, via le cycle CNO, a pour effet de réduire l'abondance relative de ^{15}N par rapport à l'isotope principal ^{14}N et au contraire d'enrichir le gaz de l'étoile en isotope rare ^{13}C au détriment de ^{12}C , mais ne modifie pas les abondances relatives des isotopes du soufre et du silicium. En outre, le rapport isotopique $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ indique que la surface de l'étoile a été ultérieurement ré-enrichie en ^{12}C par apport de gaz en provenance du cœur de carbone de l'étoile.

La recherche, par l'observation, avec le 30m de l'IRAM, des raies (1-0) ou (2-1) des molécules ^{12}CO et ^{13}CO dans des enveloppes circumstellaires n'a pas permis jusqu'à présent de détecter d'autres étoiles de type J, c'est-à-dire anormalement riches en ^{13}C , que les 4 étoiles découvertes par des observations optiques. Le problème de l'origine de l'enrichissement galactique en ^{13}C demeure donc posé (l'apport des géantes rouges normales, moins enrichies en ^{13}C , semble insuffisant) et nous suggérons de poursuivre cette recherche. Les rapports isotopiques $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ déterminés, à partir des raies moléculaires millimétriques de CO et de CS, dans les 4 étoiles de type J observées sont très voisins des valeurs mesurées à l'aide d'observations infrarouges. Il semble cependant que les observations radio fournissent des rapports isotopiques un peu plus faibles que ceux déduits des observations infrarouges et c'est peut-être là que réside l'intérêt principal de ces mesures. Si ce résultat était confirmé par l'observation de transitions et de molécules supplémentaires, il pourrait conduire à deux conclusions importantes : d'une part les valeurs, inférieures à 3.4, des rapports isotopiques $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$ mesurés en radio, remettraient en cause l'explication de l'enrichissement en ^{13}C des étoiles de type J par le seul processus de combustion de l'hydrogène à température modérée (c'est-à-dire via le cycle CNO), d'autre part, nous suggérons que le désaccord entre les mesures radio et infrarouge pourrait peut-être s'expliquer par le fait que les deux types de mesures portent sur des couches différentes de l'enveloppe circumstellaire, qui ont donc été éjectées de la surface de l'étoile à des époques différentes. Si cette interprétation se confirmait, la comparaison des rapports isotopiques mesurés en radio et en infrarouge dans une même enveloppe pourrait fournir une méthode de mesure de l'évolution temporelle des rapports isotopiques à la surface de l'étoile.

Les mesures, à l'aide d'observations infrarouge, des rapports isotopiques de l'oxygène dans les enveloppes de géantes rouges dans la phase AGB fournissent des valeurs difficilement explicables par les modèles théoriques actuels. L'observation, avec le 30m de l'IRAM, des transitions (1-0) et (2-1) des isotopes carbonés et oxygénés de CO a permis d'étendre ces mesures à cinq enveloppes très opaques, inaccessibles aux observations infrarouges et correspondant à des stades d'évolution très avancés le long et même au delà de la phase AGB. Ces mesures confirment, au moins pour trois étoiles, les sous-abondances en isotopes rares observées par rapport aux prédictions théoriques. Nous suggérons de les préciser (en particulier grâce à une redétermination du rapport $^{12}\text{C}/^{13}\text{C}$, souvent biaisé par l'opacité des transitions de l'isotope principal et que nous utilisons pour mesurer les rapports isotopiques de l'oxygène) et de les compléter, en les étendant à d'autres enveloppes opaques très évoluées. Nous proposons également de déterminer, à l'aide d'observations radio, les rapports isotopiques de l'oxygène dans quelques enveloppes moins opaques et de les comparer aux mesures effectuées, dans les mêmes enveloppes, à partir d'observations

infrarouges, afin de déceler d'éventuelles différences dues à l'évolution temporelle des rapports isotopiques lors de la phase AGB.

Enfin, je conclurai l'ensemble des travaux exposés dans ce manuscrit par une photographie du radiotélescope de 30m de l'IRAM, avec lequel nous avons effectué toutes les observations présentées ici.



Annexe A : Raies identifiées dans IRC+10216

MOLECULE	TRANSITION	FREQUENCE (MHz)
^{12}CO	$J = 1 - 0$	115271
^{13}CO	$J = 1 - 0$	110201
C^{18}O	$J = 1 - 0$	109782
C^{17}O	$J = 1 - 0$	112359
HCN	$J = 1 - 0$	88631
HCN $v = 020$	$J = 1 - 0$	89085
H^{13}CN	$J = 1 - 0$	86340
	$J = 2 - 1$	172678
HC^{15}N	$J = 1 - 0$	86055
HNC	$J = 1 - 0$	90664
HN^{13}C	$J = 1 - 0$	87091
HC_3N	$J = 9 - 8$	81881
	$J = 10 - 9$	90979
	$J = 11 - 10$	100076
	$J = 12 - 11$	109173
	$J = 15 - 14$	136464
	$J = 16 - 15$	145561
	$J = 17 - 16$	154657
	$J = 18 - 17$	163753
	$J = 19 - 18$	172849
$\text{HC}_3\text{N } v7$	$J = 15 - 14$	136800
		136996
	$J = 16 - 15$	145919
$\text{HC}_3\text{N } v6$	$J = 16 - 15$	145914
H^{13}CCCN	$J = 10 - 9$	88167
	$J = 11 - 10$	96983
	$J = 12 - 11$	105799
	$J = 15 - 14$	132246
	$J = 16 - 15$	141062
	$J = 17 - 16$	149877

Table A.1 (suite)

MOLECULE	TRANSITION	FREQUENCE (MHz)
HC ¹³ CCN	J = 9 - 8	81534
	J = 10 - 9	90593
	J = 11 - 10	99652
	J = 12 - 11	108710
	J = 15 - 14	135886
	J = 16 - 15	144943
	J = 17 - 16	154001
HCC ¹³ CN	J = 9 - 8	81542
	J = 10 - 9	90602
	J = 11 - 10	99661
	J = 12 - 11	108721
	J = 15 - 14	135899
	J = 16 - 15	144957
	J = 17 - 16	154016
HC ₅ N	J = 31 - 30	82539
	J = 32 - 31	85201
	J = 33 - 32	87863
	J = 34 - 33	90526
	J = 35 - 34	93188
	J = 36 - 35	95850
	J = 37 - 36	98512
	J = 38 - 37	101175
	J = 39 - 38	103837
	J = 40 - 39	106499
	J = 41 - 40	109161
	J = 42 - 41	111823
	J = 49 - 48	130456
	J = 51 - 50	135780
	J = 52 - 51	138442
SiO	J = 2 - 1	86847
	J = 3 - 2	130269
²⁹ SiO	J = 2 - 1	85759
	J = 4 - 3	171513
³⁰ SiO	J = 2 - 1	84746
	J = 4 - 3	169487

Table A.1 (suite)

MOLECULE	TRANSITION	FREQUENCE (MHz)
SiS	J = 5 - 4	90771
	J = 6 - 5	108924
	J = 8 - 7	145227
	J = 9 - 8	163377
SiS v = 2	J = 5 - 4	89888
	J = 6 - 5	107864
SiS v = 1	J = 6 - 5	108394
	J = 8 - 7	144520
	J = 9 - 8	162582
²⁹ SiS	J = 5 - 4	89104
	J = 6 - 5	106923
	J = 8 - 7	142559
	J = 9 - 8	160375
³⁰ SiS	J = 5 - 4	87550
	J = 6 - 5	105059
	J = 8 - 7	140074
	J = 9 - 8	157580
Si ³⁴ S	J = 5 - 4	88286
	J = 6 - 5	105941
	J = 8 - 7	141250
	J = 9 - 8	158903
Si ³³ S	J = 5 - 4	89489
	J = 6 - 5	107385
	J = 8 - 7	143175
	J = 9 - 8	161069
CS	J = 2 - 1	97981
	J = 3 - 2	146969
CS v = 1	J = 2 - 1	97271
	J = 3 - 2	145904
¹³ CS	J = 2 - 1	92494
	J = 3 - 2	138739
C ³⁴ S	J = 2 - 1	96413
	J = 3 - 2	144717
C ³³ S	J = 2 - 1	97172
	J = 3 - 2	145756
¹³ C ³⁴ S	J = 3 - 2	136387

Table A.1 (suite)

MOLECULE	TRANSITION	FREQUENCE (MHz)
C ₂ S	NJ = 7,6 - 6,5	6181
	NJ = 7,7 - 6,6	90686
	NJ = 7,8 - 6,7	93870
	NJ = 8,7 - 7,6	99866
	NJ = 8,8 - 7,7	103641
	NJ = 8,9 - 7,8	106348
	NJ = 9,8 - 8,7	113410
	NJ = 10,11 - 9,10	131552
	NJ = 11,10 - 10,9	140181
	NJ = 12,12 - 11,11	155454
	NJ = 12,13 - 11,12	156982
C ₃ S	J = 15 - 14	86708
	J = 16 - 15	92489
	J = 17 - 16	98268
	J = 18 - 17	104048
	J = 19 - 18	109828
	J = 24 - 23	138725
	J = 25 - 24	144504
	J = 27 - 26	156062
	J = 29 - 28	167619
CCH	NJ,F=1,1.5, 1 - 0,0.5, 1	87284
	NJ,F=1,1.5, 2 - 0,0.5, 1	87317
	NJ,F=1,1.5, 1 - 0,0.5, 0	87329
	NJ,F=1,0.5, 1 - 0,0.5, 1	87407
	NJ,F=1,0.5, 0 - 0,0.5, 1	87407
	NJ,F=1,0.5, 1 - 0,0.5, 0	87446
	NJ,F=2,2.5, 2 - 1,1.5, 2	174635
	NJ,F=2,2.5, 3 - 1,1.5, 2	174663
	NJ,F=2,2.5, 2 - 1,1.5, 1	174667
	NJ,F=2,1.5, 2 - 1,0.5, 1	174722
	NJ,F=2,1.5, 1 - 1,0.5, 0	174728
	NJ,F=2,1.5, 1 - 1,0.5, 1	174733
	NJ,F=2,1.5, 2 - 1,1.5, 2	174807
	NJ,F=2,1.5, 1 - 1,1.5, 1	174851

Table A.1 (suite)

MOLECULE	TRANSITION	FREQUENCE (MHz)
$C_3H\ 2\Pi_{1/2}$	N = 4.5 - 3.5	97995
		98011
	N = 6.5 - 5.5	141636
		141709
	N = 7.5 - 6.5	163491
$C_3H\ 2\Pi_{3/2}$	N = 3.5 - 2.5	80388
		80421
	N = 4.5 - 3.5	103319
		103372
	N = 6.5 - 5.5	149107
		149212
	N = 7.5 - 6.5	171959
C_4H	N = 9 - 8	85634
		85672
	N = 10 - 9	95150
		95189
	N = 11 - 10	104667
		104705

Table A.1 (suite)

MOLECULE	TRANSITION	FREQUENCE (MHz)
C ₄ H	N = 12 - 11	114182
		114221
	N = 14 - 13	133214
		133252
	N = 15 - 14	142729
		142767
	N = 16 - 15	152244
		152282
C ₄ H 2v7	N = 17 - 16	161758
		161797
	N = 9 - 8	86048
		86105
	N = 10 - 9	95611
		95668
	N = 11 - 10	105174
		105231
	N = 12 - 11	114737
		114794
	N = 14 - 13	133862
		133919
	N = 15 - 14	143424
		143481
	N = 16 - 15	152986
		153042
	N = 17 - 16	162548
		162604
	N = 18 - 17	172109
		172165

Table A.1 (suite)

MOLECULE	TRANSITION	FREQUENCE (MHz)
$C_4H \nu_7, {}^2\Pi_{1/2}$	$N = 8.5 - 7.5$	83947
		84123
	$N = 9.5 - 8.5$	93586
		93863
	$N = 10.5 - 9.5$	103266
		103577
	$N = 11.5 - 10.5$	112923
		113266
	$N = 13.5 - 12.5$	132179
		132587
	$N = 14.5 - 13.5$	141784
		142724
$C_4H \nu_7, {}^2\Pi_{3/2}$	$N = 15.5 - 14.5$	151376
		151847
	$N = 16.5 - 15.5$	160957
		161460
	$N = 17.5 - 16.5$	170530
	$N = 9.5 - 8.5$	87142
		87372
	$N = 10.5 - 9.5$	96478
		96741
	$N = 11.5 - 10.5$	105838
		106133
$C_4H \nu_7, {}^2\Pi_{3/2}$	$N = 12.5 - 11.5$	115217
		115545
	$N = 14.5 - 13.5$	134024
		134416
	$N = 15.5 - 14.5$	143445
		143870
	$N = 16.5 - 15.5$	152880
		153335
	$N = 17.5 - 16.5$	162322
		162808
	$N = 18.5 - 17.5$	171772
		172289

Table A.1 (suite)

MOLECULE	TRANSITION	FREQUENCE (MHz)
$C_5H\ 2\Pi_{1/2}$	N = 17.5 - 16.5	83541
		83547
	N = 18.5 - 17.5	88315
		88321
	N = 19.5 - 18.5	93089
		93095
	N = 20.5 - 19.5	97862
		97869
	N = 21.5 - 20.5	102636
		102643
	N = 22.5 - 21.5	107410
		107417
	N = 23.5 - 22.5	112183
		112190
$C_5H\ 2\Pi_{3/2}$	N = 28.5 - 27.5	136051
		136060
	N = 17.5 - 16.5	84108
		84110
	N = 18.5 - 17.5	88914
		88916
	N = 19.5 - 18.5	93719
		93722
	N = 20.5 - 19.5	98525
		98527
	N = 21.5 - 20.5	103330
		103333
	N = 22.5 - 21.5	108135
		108138
$C_6H\ 2\Pi_{1/2}$	N = 23.5 - 22.5	112940
		112944
	N = 30.5 - 29.5	85131
		85176
	N = 31.5 - 30.5	87921
		87968
	N = 33.5 - 32.5	93502
		93551
	N = 34.5 - 33.5	96293
		96342
$C_6H\ 2\Pi_{1/2}$	N = 35.5 - 34.5	99083
		99134
	N = 36.5 - 35.5	101873
		101925
	N = 38.5 - 37.5	107453
		107508

Table A.1 (suite)

MOLECULE	TRANSITION	FREQUENCE (MHz)
C_6H $^2\Pi_{3/2}$	N = 29.5 - 28.5	81778
		81801
	N = 30.5 - 29.5	84550
		84575
	N = 31.5 - 30.5	87321
		87348
	N = 32.5 - 31.5	90093
		90121
	N = 33.5 - 32.5	92865
		92895
	N = 34.5 - 33.5	95637
		95668
	N = 35.5 - 34.5	98409
		98442
	N = 36.5 - 35.5	101180
		101215
	N = 37.5 - 36.5	103952
		103989
	N = 38.5 - 37.5 ?	106724
	N = 40.5 - 39.5	112267
		112310
	N = 41.5 - 40.5	115039
		115083
	N = 48.5 - 47.5	134440
		134499
	N = 49.5 - 48.5	137212
CN	N = 1 - 0	113123
		113144
		113170
		113191
		113488
		113491
		113500
		113509
		113520
^{13}CN	N = 1 - 0	108637
		108651
		108658
		108780
		108782

Table A.1 (suite)

MOLECULE	TRANSITION	FREQUENCE (MHz)
C ₃ N	N = 9 - 8	89045
		89064
	N = 10 - 9	98940
		98959
	N = 11 - 10	108834
		108853
	N = 14 - 13	138516
		138534
	N = 15 - 14	148409
C ₃ NH		148428
	N = 16 - 15	158302
		158321
	N = 17 - 16	168195
		168214
	J = 9 - 8	80361
	J = 10 - 9	89289
HSiCC?	J = 11 - 10	98218
	J = 12 - 11	107146
	J = 13 - 12	116075
	J = 15 - 14	133931
	J = 7 - 6	83523
		83538
	J = 8 - 7	95454
		95469
	J = 9 - 8	107385
		107400
	J = 12 - 11	143172
		143187
	J = 13 - 12	155099
		155114
	J = 14 - 13	167025
		167040

Table A.1 (suite)

MOLECULE	TRANSITION	FREQUENCE (MHz)
Na ³⁵ Cl	J = 7 - 6	91170
	J = 8 - 7	104190
	J = 10 - 9	130223
	J = 11 - 10	143237
	J = 12 - 11	156249
	J = 13 - 12	169257
Na ³⁷ Cl	J = 8 - 7	101962
Al ³⁵ Cl	J = 6 - 5	87458
	J = 7 - 6	102032
	J = 10 - 9	145744
	J = 11 - 10	160312
Al ³⁷ Cl	J = 10 - 9	142323
	J = 11 - 10	156547
K ₃₅ Cl	J = 13 - 12	99928
	J = 14 - 13	107611
	J = 17 - 16	130650
	J = 19 - 18	146003
	J = 20 - 19	153679
	J = 21 - 20	161349
FAl	J = 3 - 2	98927
	J = 4 - 3	131899
	J = 5 - 4	164868
H ₂ S	J _{K-1K+1} = ¹ ₁₀ - ¹ ₀₁	168763
SiC	J = 2 - 1 Ω = 1	80988
		81062
	J = 2 - 1 Ω = 0	83842
	J = 4 - 3 Ω = 2	157494
	J = 4 - 3 Ω = 1	161977
		162121

Table A.1 (suite)

MOLECULE	TRANSITION	FREQUENCE (MHz)
SiCC	$J_{K-1K+1} = 4_{04} - 3_{03}$	93064
	$J_{K-1K+1} = 4_{23} - 3_{22}$	94245
	$J_{K-1K+1} = 4_{22} - 3_{21}$	95589
	$J_{K-1K+1} = 5_{05} - 4_{04}$	115382
	$J_{K-1K+1} = 6_{06} - 5_{05}$	137180
	$J_{K-1K+1} = 6_{25} - 5_{24}$	140920
	$J_{K-1K+1} = 6_{24} - 5_{23}$	145326
	$J_{K-1K+1} = 7_{07} - 6_{06}$	158499
	$J_{K-1K+1} = 7_{26} - 6_{25}$	164069
	$J_{K-1K+1} = 7_{62} - 6_{61}$	164766
	$J_{K-1K+1} = 7_{61} - 6_{60}$	164766
	$J_{K-1K+1} = 7_{26} - 7_{07}$	175844
³⁰ SiCC	$J_{K-1K+1} = 4_{04} - 3_{03}$	90562
	$J_{K-1K+1} = 4_{23} - 3_{22}$	91608
	$J_{K-1K+1} = 4_{22} - 3_{21}$	92794
	$J_{K-1K+1} = 5_{05} - 4_{04}$	112355
	$J_{K-1K+1} = 6_{06} - 5_{05}$	133671
	$J_{K-1K+1} = 6_{25} - 5_{24}$	137013
	$J_{K-1K+1} = 6_{43} - 5_{42}$	137732
	$J_{K-1K+1} = 6_{42} - 5_{41}$	137735
	$J_{K-1K+1} = 6_{24} - 5_{23}$	140956
	$J_{K-1K+1} = 6_{43} - 5_{42}$	141751
	$J_{K-1K+1} = 6_{42} - 5_{41}$	141755
	$J_{K-1K+1} = 7_{26} - 6_{25}$	159548
	$J_{K-1K+1} = 7_{44} - 6_{43}$	160807
	$J_{K-1K+1} = 7_{43} - 6_{42}$	160817
²⁹ SiCC	$J_{K-1K+1} = 4_{04} - 3_{03}$	91772
	$J_{K-1K+1} = 4_{23} - 3_{22}$	92882
	$J_{K-1K+1} = 4_{22} - 3_{21}$	94137
	$J_{K-1K+1} = 6_{06} - 5_{05}$	133370
	$J_{K-1K+1} = 6_{25} - 5_{24}$	138900
	$J_{K-1K+1} = 6_{43} - 5_{42}$	139675
	$J_{K-1K+1} = 6_{42} - 5_{41}$	139679
	$J_{K-1K+1} = 6_{24} - 5_{23}$	143061
	$J_{K-1K+1} = 7_{07} - 6_{06}$	156455
	$J_{K-1K+1} = 7_{25} - 6_{24}$	168052

Table A.1 (suite)

MOLECULE	TRANSITION	FREQUENCE (MHz)
Si ¹³ CC	$J_{K-1K+1} = 4_{31} - 3_{30}$	92374
	$J_{K-1K+1} = 5_{15} - 4_{14}$	107960
C ₃ H ₂ para	$J_{K-1K+1} = 3_{22} - 3_{13}$	84728
	$J_{K-1K+1} = 4_{04} - 3_{13}$	150821
	$J_{K-1K+1} = 3_{22} - 2_{11}$	155518
C ₃ H ₂ ortho	$J_{K-1K+1} = 2_{12} - 1_{01}$	85339
	$J_{K-1K+1} = 3_{12} - 2_{21}$	145090
	$J_{K-1K+1} = 4_{14} - 3_{03}$	150852
CH ₃ CN	$J_K = 5_4 - 4_4$	91959
	$J_K = 5_3 - 4_3$	91971
	$J_K = 5_2 - 4_2$	91980
	$J_K = 5_1 - 4_1$	91985
	$J_K = 5_0 - 4_0$	91987
	$J_K = 6_5 - 5_5$	110330
	$J_K = 6_4 - 5_4$	110349
	$J_K = 6_3 - 5_3$	110364
	$J_K = 6_2 - 5_2$	110375
	$J_K = 6_1 - 5_1$	110381
	$J_K = 6_0 - 5_0$	110383

Annexe B : Observations de l'enveloppe circumstellaire V Hya

V Hya est une étoile carbonée dont l'enveloppe circumstellaire a été détectée pour la première fois en émission $^{12}\text{CO}(1-0)$ par Zuckerman *et al*, 1977. La raie que ces auteurs ont détectée, puis que Zuckerman et Dyck ont réobservée en 1986, présente une forme inhabituelle où, à la composante large et à flancs abrupts caractéristique des enveloppes circumstellaires, se superpose un pic assez intense, interprété par Zuckerman et Dyck (1986) comme la manifestation possible d'une émission maser dans la raie $^{12}\text{CO}(1-0)$. Afin de tester cette hypothèse, nous avons réalisé en juillet 1987 une cartographie de l'émission $^{12}\text{CO}(1-0)$ de cette enveloppe, à l'aide du télescope de 30m de l'IRAM. Les spectres que nous avons observés (voir la Figure 2 de l'article qui suit) montrent que l'émission de l'enveloppe est aisément résolue par le lobe de 20" du télescope à la fréquence de 115 GHz et que le pic intense demeure visible, quoique plus faible, en une position décalée de 20 secondes d'arc en Ascension Droite du centre de l'enveloppe. Ce dernier point permet d'écarter l'hypothèse d'une émission maser, dont la source ne pourrait pas être résolue par nos observations; en effet les cartes interférométriques d'émission maser dans les enveloppes circumstellaires indiquent que ces régions s'étendent sur quelques rayons stellaires à quelques milliers de rayons stellaires, selon les molécules, (voir par exemple Baud, 1981; Reid et Moran, 1981; Elitzur, 1980; Bujarrabal et Nguyen-Q-Rieu, 1981), c'est-à-dire que leurs dimensions restent d'une taille très inférieures à 10^{17} cm, la limite de résolution de nos observations, à la distance de VHya, estimée par Claussen *et al*, (1987), à 340 pc. En outre, grâce à un rapport signal/bruit plus élevé que celui des observations précédentes de V Hya, nous avons découvert que, contrairement aux profils caractéristiques des enveloppes sphériques en expansion (voir le chapitre 3), les raies émises par l'enveloppe V Hya présentent des flancs peu abrupts, qui se prolongent par des ailes jusqu'à quelques 30 km/s de la vitesse centrale des raies (voir la Figure 2 de l'article qui suit). Nous avons interprété cette forme de raie comme la superposition d'une émission d'enveloppe sphérique en expansion, responsable de la composante large, et d'un flot bipolaire à plus grande vitesse, qui se manifeste par les ailes de raies. (Une interprétation tout-à-fait similaire a été proposée par Tsuji *et al*, qui ont observé l'émission $^{12}\text{CO}(1-0)$ de l'enveloppe avec le télescope de 45 m de Nobeyama). Les cartes Ascension Droite - Vitesse et Déclinaison - Vitesse de l'émission de l'enveloppe (voir les **Figures B.1a** et **B.1b**) indiquent clairement que le flot bipolaire s'étend principalement dans une direction est-ouest.

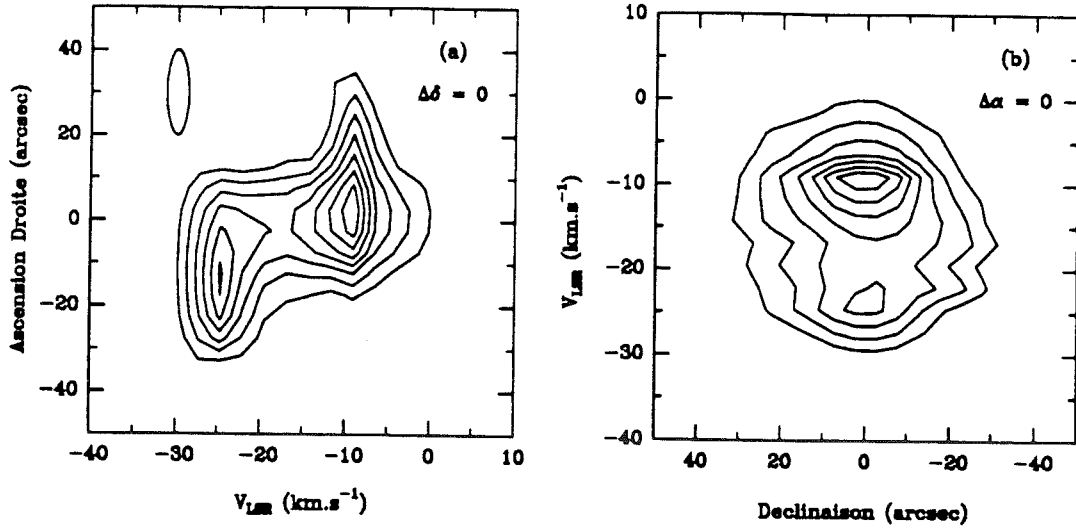


Figure B.1 : Cartes vitesse position de l'émission de $^{12}\text{CO}(1-0)$ dans l'enveloppe V Hya. La carte Vitesse - Ascension Droite (en a) a été tracé à la déclinaison du centre de l'enveloppe, alors que la carte Déclinaison - Vitesse (en b) correspondant à l'ascension droite du centre de l'enveloppe. Le premier contour représente une intensité de 0.65 K et l'intervalle entre deux contours est de 0.35 K. La résolution spatiale (20") et la résolution en vitesse (2.6 km/s) sont figurées par l'ellipse en haut et à gauche de chaque carte.

Ce résultat est également apparent sur les cartes d'émission canal par canal (**Figure B.2**) ainsi que sur les cartes d'émission intégrée dans trois intervalles de vitesses : l'aile rouge de -9.1 à +20 km/s, l'aile bleue de -24.7 à -40 km/s et la composante centrale de -24.7 à -9.1 km/s (voir la Figure 3 de l'article ci-après).

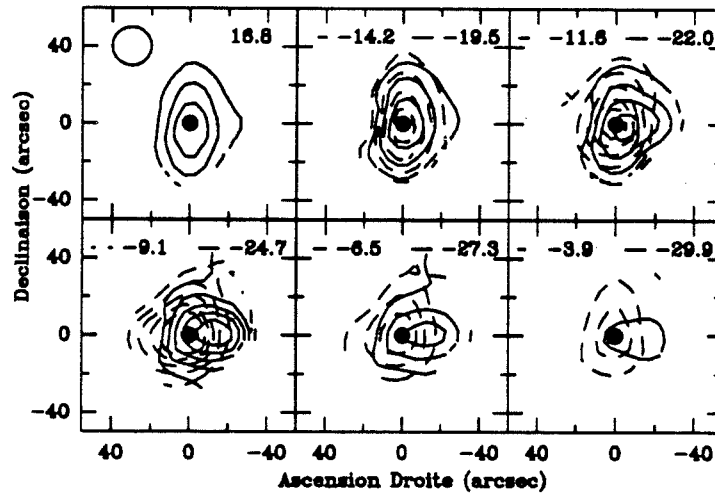


Figure B.2 : Cartes de l'intensité de $^{12}\text{CO}(1-0)$ dans les 11 canaux centraux des spectres. La vitesse centrale de l'enveloppe est -16.8 km/s et la largeur d'un canal est de 2.6 km/s. Le premier contour correspond à une intensité de 0.7 K et l'intervalle entre deux contours est 0.6 K. Le disque noir indique la position du centre de l'enveloppe ($\alpha = 10^{\text{h}} 49^{\text{m}} 11.3^{\text{s}}$ et $\delta = -20^{\circ} 59' 06''$) et le cercle en haut et à gauche de la première carte figure le lobe à mi-puissance de l'antenne.

Simultanément, M. Jura et C. Maizels ont observé que les raies en absorption du spectre visible de l'étoile présentent des largeurs importantes qui peuvent être interprétées comme le signe d'une grande vitesse de rotation de l'étoile : la projection de celle-ci sur la ligne de visée serait de 15 km/s. Cette valeur est notablement plus élevée que la limite de 2 km/s, calculée en supposant la conservation du moment cinétique de l'étoile, à partir de la vitesse de rotation maximale compatible avec la cohésion de l'étoile lorsqu'elle était encore sur la séquence principale. La conjonction des deux phénomènes nous a amenés à suggérer qu'ils pourraient s'expliquer par la présence d'un compagnon proche, qui aurait permis l'accélération de la rotation de V Hya et cette rotation rapide conduirait à un aplatissement de l'étoile, responsable d'une émission anisotrope de gaz à grande vitesse.

Afin de tester cette hypothèse, nous avons effectué avec le satellite IUE (International Ultraviolet Explorer), de la NASA, une observation ultraviolette de V Hya. En effet, la présence d'un compagnon proche pourrait se traduire par une émission UV en provenance du gaz chaud du disque d'accrétion de celui-ci. Cette observation n'a pas permis de détecter d'émission continue UV, ce qui n'exclut cependant pas la présence d'un compagnon car l'épaisseur optique de l'enveloppe peut être très importante. La limite supérieure du flux UV ainsi obtenue devrait nous permettre de définir quelques contraintes sur le type de l'étoile compagnon éventuel de V Hya.

THE BIPOLAR OUTFLOW FROM THE ROTATING CARBON STAR, V HYDRAE

C. KAHANE

Observatoire de Grenoble

AND

C. MAIZELS AND M. JURA

Department of Astronomy, UCLA

Received 1987 October 22; accepted 1988 January 26

ABSTRACT

We have obtained a high-resolution optical spectrum of the mass-losing red giant carbon star, V Hya, and we have mapped the ^{12}CO ($J = 1-0$) millimeter emission in the circumstellar envelope around this star. We find that the CO emission is extended, clearly anisotropic and can be interpreted as the superposition of an isotropic emission with that of a bipolar flow. The optical spectrum of the photosphere suggests that this star is rotating with $v \sin i$ between 10 and 20 km s^{-1} . We interpret these data, together, to suggest that the bipolar nature of the outflow results from the flattening of the star induced by its rapid rotation.

Subject headings: stars: carbon — stars: circumstellar shells — stars: mass loss — stars: rotation

I. INTRODUCTION

Carbon stars typically are losing mass at $> 10^{-7} M_{\odot} \text{ yr}^{-1}$ (Claussen *et al.* 1987). In the best model to explain these outflows, pulsations levitate matter above the photosphere, the gas cools and grains form, and then matter is driven away from the star by radiation force (see Jura 1986). This picture, however, does not obviously explain anisotropies that are observed in many outflows (see, for example, Morris 1981, 1987). Here, we provide evidence that V Hya has a bipolar outflow that is probably induced by asymmetries in the mass-losing star caused by its rotation.

II. OPTICAL OBSERVATIONS

The optical observations were obtained on 1987 May 18 and 19 U.T. using the 120 inch (3 m) Shane telescope at Lick Observatory. We used the 800×800 CCD detector at coude. The 40 inch (1 m) camera with a 900 lines mm^{-1} grating in second order yielded a dispersion of $0.073 \text{ \AA pixel}^{-1}$ or 4.8 \AA mm^{-1} . The spectral resolution was 0.16 \AA . An OG 515 filter blocked unwanted orders, transmitting 1% blueward of 5000 \AA . Our high S/N , high-dispersion spectra span 56 \AA with the central wavelength at 7462 \AA .

The spectrum of V Hya is striking in that it displays broadened absorption lines. A remarkable feature of carbon stars is the strong similarity of their optical spectra. We have exploited the similar nature of carbon star spectra to estimate the rotation velocity of V Hya by comparing it with other carbon stars.

We chose as "templates" the six other carbon stars observed during the same period as V Hya. Since the placement of the continuum is difficult to estimate, all the spectra were normalized so the area under each spectrum, from 7434 \AA to 7492 \AA , was the same for all stars. The templates were broadened by convolving the spectra with a rotation profile (Gray 1976) sequentially from $v \sin i = 1-30 \text{ km s}^{-1}$ (see Fig. 1), where i is the view angle of the rotation axis and v is the equatorial velocity. We estimated the best $v \sin i$ fit of each template to V Hya both visually and with a simple least-squares fit. The agreement between both estimates is of the order of 2 km s^{-1} .

Table 1 lists the best fit of each template to V Hya: the span in rotation velocity is from 9 to 19 km s^{-1} .

The range in estimated $v \sin i$ might be due to a number of causes. Although the six template spectra demonstrate strong similarity to each other, there are differences in the ratios of line strengths which might affect the fit. Also, if the standard star is rotating or for some other reason has broadened lines, we would fit a smaller $v \sin i$ to V Hya than with unbroadened template. We estimate $v \sin i$ for V Hya to be $15 \pm 5 \text{ km s}^{-1}$.

This rapid rotation is surprising. If we assume simple conservation of angular momentum from the main sequence to red giant expansion, then an observed $v \sin i$ greater than 2 km s^{-1} would exceed the break-up velocity for the star in its main-sequence phase. The most plausible explanation that we have for the rapid rotation of V Hya is that it was spun up by a close companion, one that is perhaps now incorporated into the envelope of this red giant, when V Hya expanded to or when it actually reached its current radius (see Webbink 1976; Morris 1981). This is then similar to the model for FK Comae stars proposed by Bopp and Stencel (1981). We cannot rule out that the observed line broadening in V Hya is due to macro-turbulence. However, the combination of both unusual and distinctive optical and radio spectra, together, points toward a single interpretation. The most obvious and straightforward model is that the star is rotating rapidly and therefore losing mass in a bipolar rather than spherically symmetric flow.

III. RADIO OBSERVATIONS

V Hya is a classical N-type carbon star, first seen in ^{12}CO ($J = 1-0$) emission in 1976 June (Zuckerman *et al.* 1977). It was reobserved in 1985 June (Zuckerman and Dyck 1986), and it displayed a narrow emission feature superposed on a characteristic broad stellar profile. This spike was not present on the 1976 spectrum and was interpreted as a CO maser emission.

To check this interpretation, we observed V Hya in ^{12}CO ($1-0$) emission with the IRAM 30 m telescope on 1987 June 29 to 1987 July 3. The telescope equipment has been described in detail by Baars *et al.* (1987). The telescope was equipped with a Schottky receiver (DSB temperature of 300 K). The beam-

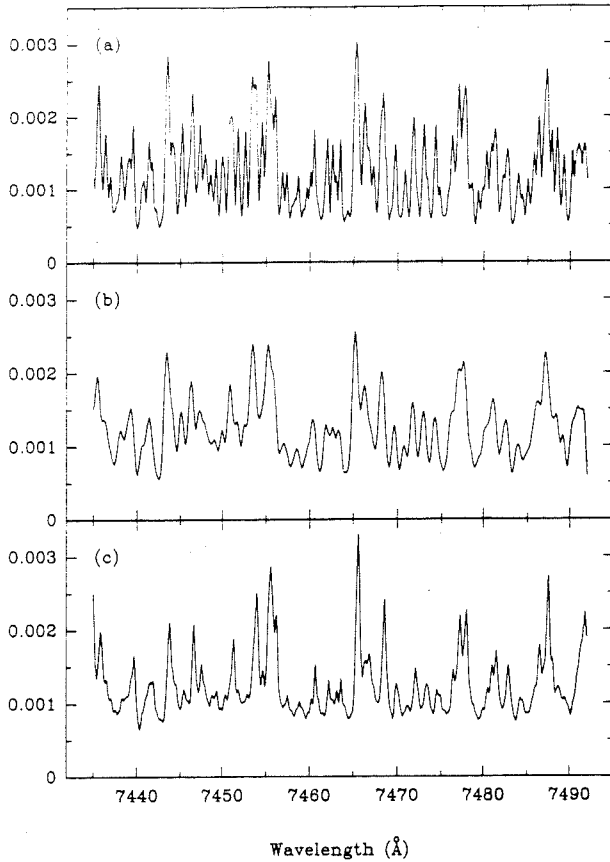


FIG. 1.—The normalized absorption-line spectrum of a template star, U Hya, in (a). The same spectrum broadened by a rotation velocity of 16 km s^{-1} (see text) in (b). The normalized absorption-line spectrum of V Hya in (c).

width was measured to be $21''$ at 115 GHz , and the pointing was frequently checked and found to be accurate within $3''$. The backend consisted of 256 channels, each 1 MHz wide. The observations were made in position-switching mode with a reference point $500''$ east from the star position. The antenna temperature scale was calibrated every 20 minutes or so by successively observing a cold load, a room-temperature load, and the sky. The atmospheric opacity at the zenith was typically $0.25\text{--}0.35$. The temperatures reported in Figure 2, denoted T_A^* , are single-sideband antenna temperatures reported above atmosphere. The brightness temperatures T_B are derived from the antenna temperatures by $T_B = T_A^*/\eta$.

TABLE 1
LEAST-SQUARES FIT

Template	$v \sin i$ (km s^{-1})
U Hya	16
V CrB	12
X Cnc	13
V Oph	9
T Cnc	14
Y CVn	19

where the factor η is the ratio of the main beam to forward beam efficiencies and is measured to be 0.70.

We observed 14 positions with a spacing of $20''$, i.e., $1.0 \times 10^{17} \text{ cm}$ for a distance to V Hya of 340 pc (Claussen *et al.* 1987). The $^{12}\text{CO}(1\text{--}0)$ emission extends at least $20''$ in all four directions from the central position. A striking feature is the drastic change in line shapes from one beam to the other. The central spectrum presents a shape similar to that observed by Zuckerman and Dyck: a broad emission, typical of circumstellar envelopes, centered at a velocity of -17 km s^{-1} with a strong spike on the red side (at a velocity of -9 km s^{-1}) and a smaller one on the blue side (at -24.7 km s^{-1}). Furthermore, with the high signal-to-noise ratio of our spectrum, two wings are clearly detected. Along the declination axis, the lines are broad- and flat-topped, and wings (at least one of them) are also present. In contrast, $20''$ west and east from the central position, the lines are much narrower. The western one peaks at the same velocity as the central blue spike, and the eastern one corresponds to the red spike velocity. Both lines present a weak wing. This extension of the red spike emission rules out its interpretation as due to maser emission. Its absence on the earliest spectrum (Zuckerman *et al.* 1977) might be explained by a slight difference in pointing and/or insufficient signal to noise ratio.

Three gas components can be defined: the circumstellar envelope ($-24.7 \text{ km s}^{-1} < V_{\text{LSR}} < -9.1 \text{ km s}^{-1}$), the red flow ($-9.1 \text{ km s}^{-1} \leq V_{\text{LSR}} \leq 20 \text{ km s}^{-1}$), and the blue flow ($-40 \text{ km s}^{-1} \leq V_{\text{LSR}} \leq -24.7 \text{ km s}^{-1}$). The velocity integrated emissions of these three components are plotted in Figures 3a and 3b. The envelope is roughly circular. The displacement between the blue and the red lobes' centers is about $15''$. The blue lobe is somewhat elongated along the right ascension axis ($R_{\text{max}}/R_{\text{min}} = 1.3$), and the red lobe is more circular. Whether these low collimation factors are intrinsic or result from projection effects (bipolar flow seen almost face-on) is an open question, but it can be noticed that most bipolar flows observed in the molecular clouds present low collimation factors (Lada 1985). As both red and blue wings are present on the central profile, the opening angle θ of the bipolar flow must be larger than the view angle i of the flow axis. Furthermore, emission from the front cone is entirely blueshifted, while the far cone is entirely redshifted. This means that $\theta + i \leq \pi/2$. As the disruption limit for the equatorial velocity of the star is about 30 km s^{-1} , i cannot be much smaller than 30° and θ is the range $30^\circ\text{--}60^\circ$.

Several authors have suggested that bipolarity in circumstellar envelopes could be due to the rotation of the progenitor (Phillips and Reay 1977; Mufson and Liszt 1975). Pascoli (1987) has argued that realistic stellar rotation velocities for evolved red giants are far too low to create an effective anisotropy of the outflow. Such an argument does not apply to V Hya if the observed optical line broadening is due to rotation. Other mechanisms cannot be ruled out, but the simplest and most straightforward interpretation of our observations is that we are witnessing an anisotropic mass outflow due to the star's rotation.

IV. CONCLUSIONS

With our data, we reach several important conclusions.

1. The optical spectrum of V Hya is broadened compared to other carbon stars, and this suggests that it is rotating with $v \sin i$ between 10 km s^{-1} and 20 km s^{-1} .
2. The radio map of the circumstellar envelope around

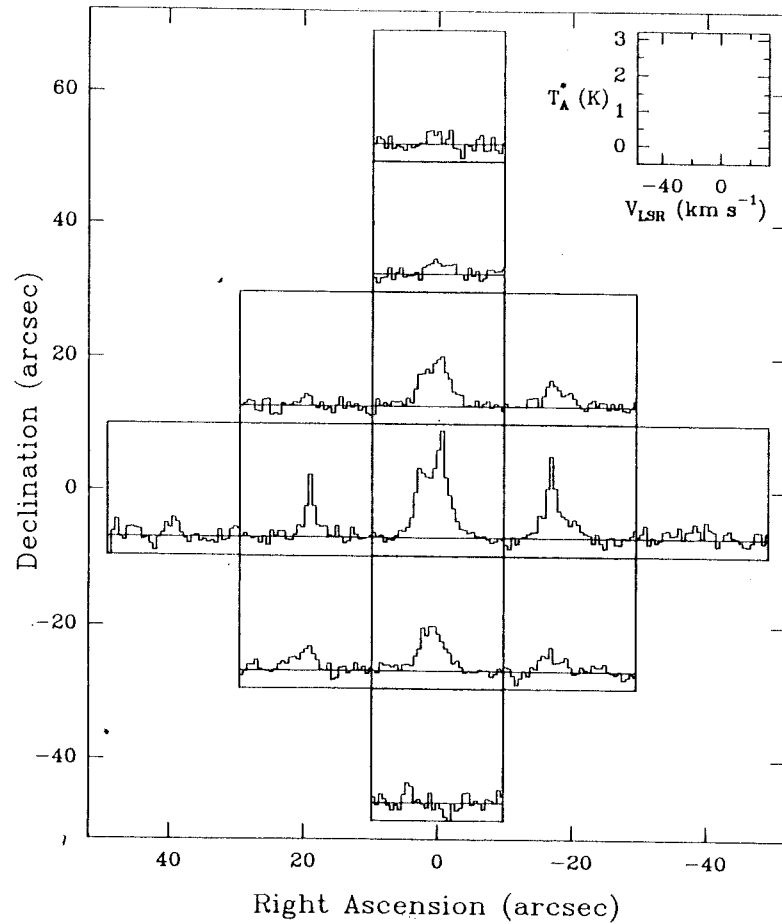


FIG. 2

FIG. 2.—The ^{12}CO (1–0) spectra observed toward V Hya. The coordinates of the (0, 0) position are those of the star: $\alpha(1950) = 10^{\text{h}}49^{\text{m}}11^{\text{s}}.3$ and $\delta(1950) = -20^{\circ}59'05''$. The velocity resolution is 2.6 km s^{-1} . First-degree polynomials have been subtracted from the spectra.

FIG. 3.—Maps of the ^{12}CO (1–0) integrated brightness temperature over three velocity ranges. (a) shows the central velocity component (“envelope”): $-24.7 \text{ km s}^{-1} < V_{\text{LSR}} < -9.1 \text{ km s}^{-1}$. The first contour is 9.0 K km s^{-1} , and the contour interval is 4.0 K km s^{-1} . The black squares represent the observed positions. (b) shows the high-velocity component (“red wing”) in dashed lines: $-9.1 \text{ km s}^{-1} \leq V_{\text{LSR}} \leq 20 \text{ km s}^{-1}$ and the low-velocity component (“blue wing”) in solid lines: $-40 \text{ km s}^{-1} \leq V_{\text{LSR}} \leq -24.7 \text{ km s}^{-1}$. In both cases the lowest contour is 7.0 K km s^{-1} . The observed positions are indicated by black squares.

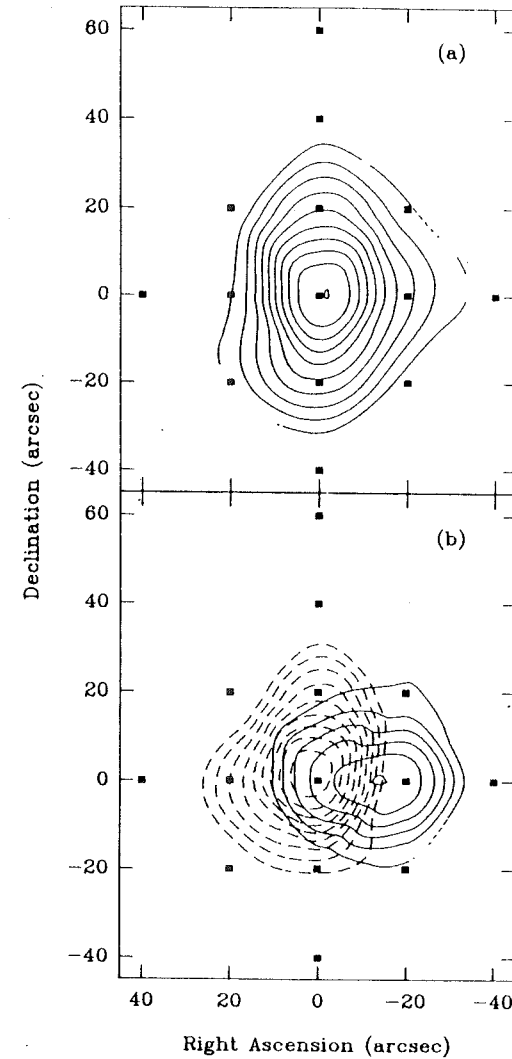


FIG. 3

L28

KAHANE, MAIZELS, AND JURA

V Hya clearly is anisotropic and presents a bipolar component.

3. It is plausible that the anisotropy in the outflow from V Hya results from the flattening produced by the rotation of the star.

4. The relatively rapid rotation of V Hya probably results from having been spun up by a close companion (which may

now be inside V Hya) during the time the main-sequence progenitor was expanding to or at its current radius.

We thank Isabel Hawkins for help in obtaining and analyzing the optical spectra, and Mirek Plavec for useful discussions about binary stars. This work has been partly supported by the NSF and by NASA.

REFERENCES

- Baars, J. W. M., Hooghoudt, B. G., Mezger, P. G., and De Jonge, M. J. 1987, *Astr. Ap.*, **175**, 319.
 Bopp, B. W., and Stencel, R. E. 1981, *Ap. J. (Letters)*, **247**, L131.
 Claussen, M. J., Kleinmann, S. G., Joyce, R. R., and Jura, M. 1987, *Ap. J. Suppl.*, **65**, 385.
 Gray, D. F. 1976, *The Observations and Analysis of Stellar Photospheres* (New York: J. Wiley).
 Jura, M. 1986, *Irish Astr. J.*, **17**, 322.
 Lada, C. J. 1985, *Ann. Rev. Astr. Ap.*, **23**, 267.
 Morris, M. 1981, *Ap. J.*, **249**, 572.
 ———. 1987, *Pub. A.S.P.*, **99**, 1115.
 Mufson, S. L., and Liszt, H. S. 1975, *Ap. J.*, **202**, 183.
 Pascoli, G. 1987, *Astr. Ap.*, **180**, 191.
 Phillips, J. P., and Reay, N. K. 1977, *Astr. Ap.*, **59**, 91.
 Webbink, R. F. 1976, *Ap. J.*, **209**, 829.
 Zuckerman, B., and Dyck, H. M. 1986, *Ap. J.*, **311**, 345.
 Zuckerman, B., Palmer, P., Morris, M., Turner, B. E., Gilra, D. P., Bowers, P. F., and Gilmore, W. 1977, *Ap. J. (Letters)*, **211**, L97.

M. JURA and C. MAIZELS: Department of Astronomy, University of California, Los Angeles, Los Angeles, CA 90024

C. KAHANE: Observatoire de Grenoble, CERMO, B.P. 68, F-38402 St. Martin D'Herès, Cedex, France

Parralèlement, nous avons effectué de nouvelles observations radio de l'enveloppe en émission $^{12}\text{CO}(2-1)$ avec le télescope de 30m de l'IRAM. En effectuant des observations à 1 mm, nous avons gagné un facteur 2 sur la résolution spatiale et sur la résolution en vitesse du télescope et bénéficié d'un récepteur moins bruyant qu'à 2 mm. En outre, les conditions d'excitation dans l'enveloppe sont telles que la raie $^{12}\text{CO}(2-1)$ est plus intense que la raie (1-0) si bien que les spectres présentent un très bon rapport signal/bruit. Afin de minimiser les risques de dégradation de la résolution spatiale des observations par dérive du pointage du télescope, nous avons effectué une quarantaine de cartes rapides de l'enveloppe (~ 5 mn de temps de télescope pour chacune) avec un pas de 5" en ascension droite et en déclinaison et nous avons fréquemment réajusté les paramètres de pointage du télescope en observant des sources ponctuelles (quasars). Le recentrage relatif des cartes ainsi obtenues a été effectué en utilisant une méthode de corrélation d'images à deux dimensions que nous ne détaillerons pas ici. La carte finale est présentée sous forme de spectres "reconstitués" dans la **Figure B.3**. Les variations de forme de spectre à spectre apparaissent extrêmement brutales, en particulier dans la direction est-ouest, et les ailes à grande vitesse sont clairement visibles sur tous les spectres.

L'interprétation de ces observations en termes de géométrie, de dynamique et d'énergétique de l'enveloppe moléculaire et du flot bipolaire est en cours; nous nous contenterons ici de présenter le même type de cartes que celles réalisées à partir de l'émission $^{12}\text{CO}(1-0)$.

Nous avons représenté dans la **Figure B.4** les cartes d'intensité canal par canal de l'émission de l'enveloppe en $^{12}\text{CO}(2-1)$ et dans la **Figure B.5** les émissions intégrées des trois composantes en vitesse. L'émission dans l'aile bleue ($V_{\text{LSR}} \leq -25.3$ km/s) présente répartition spatiale à peu près circulaire, centrée en $(\Delta\alpha, \Delta\delta) = (-10'', 0'')$ et d'un diamètre à mi intensité d'environ 12", après déconvolution du lobe de 12" de l'antenne. L'émission dans l'aile rouge ($V_{\text{LSR}} \geq -8.4$ km/s) est un peu plus intense que dans l'aile bleue; elle présente également une géométrie presque circulaire, avec une petite extension en direction du sud-est, elle est centrée en $(\Delta\alpha, \Delta\delta) = (-2'', 0'')$, c'est à dire à 8" en ascension droite de l'aile bleue, et son diamètre à mi intensité, après déconvolution du lobe de l'antenne, est de 13". La composante centrale est centrée en $(\Delta\alpha, \Delta\delta) = (-4.5'', 0'')$ et présente une forme nettement allongée : à mi-intensité son petit axe, qui présente une orientation est-ouest, est de 10" (déconvolué du lobe), alors que son grand axe, orienté nord-sud est de 18". Une telle géométrie, que la résolution spatiale insuffisante des observations de $^{12}\text{CO}(1-0)$ ne permettait pas de déceler, indique très clairement que l'enveloppe circumstellaire de V Hya s'éloigne beaucoup, indépendamment même de l'existence d'ailes à grande vitesse, de la

symétrie sphérique. Nous ne développerons pas plus longuement ici l'analyse de ces observations ni leur interprétation. Nous indiquerons simplement que les écarts à la symétrie sphérique et les éjections de matière à grande vitesse sont des caractéristiques communes à de nombreuses nébuleuses ou pre-nébuleuses planétaires (voir par exemple Bieging et Nguyen-Q-Rieu, 1988; Bachiller *et al*, 1987, 1988; Bujarrabal *et al*, 1988; Cox *et al*, 1989), dont V Hya est peut-être un très jeune exemple.

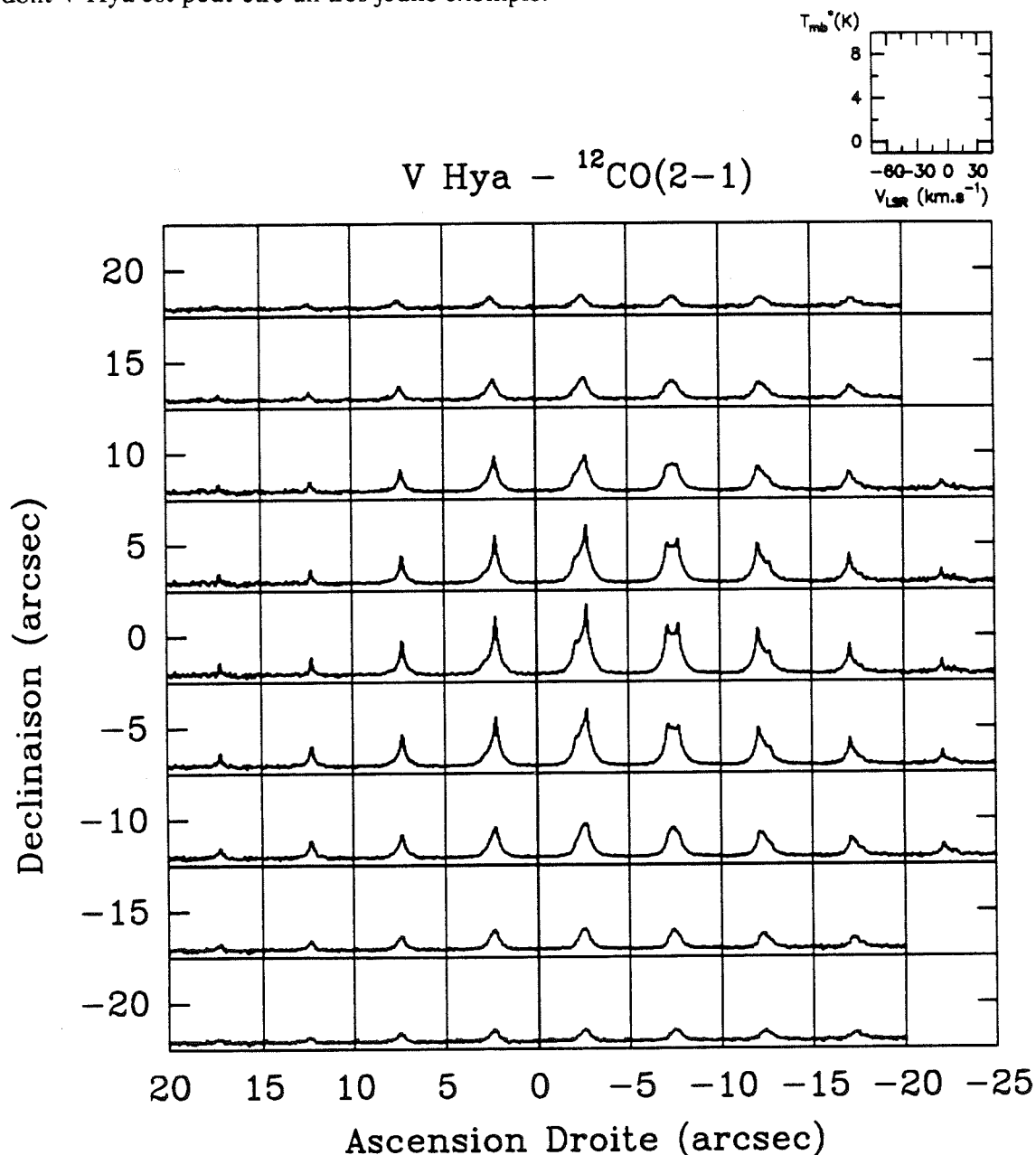


Figure B.3 : Carte des spectres d'émission $^{12}\text{CO}(2-1)$ dans l'enveloppe V Hya, reconstitués après recentrage et sommation de 40 cartes réalisées avec un pas de 5". La position du (0,0) de la carte diffère probablement de quelques secondes d'arc en ascension droite de celle des cartes d'émission $^{12}\text{CO}(1-0)$ présentées précédemment. La résolution en vitesse est de 1.3 km/s et l'intensité des raies est exprimée en température d'antenne dans le lobe principal (le rendement en lobe est de 0.45). Les échelles en vitesse et en intensité de chacun des spectres sont indiquées dans le coin supérieur droit de la Figure.

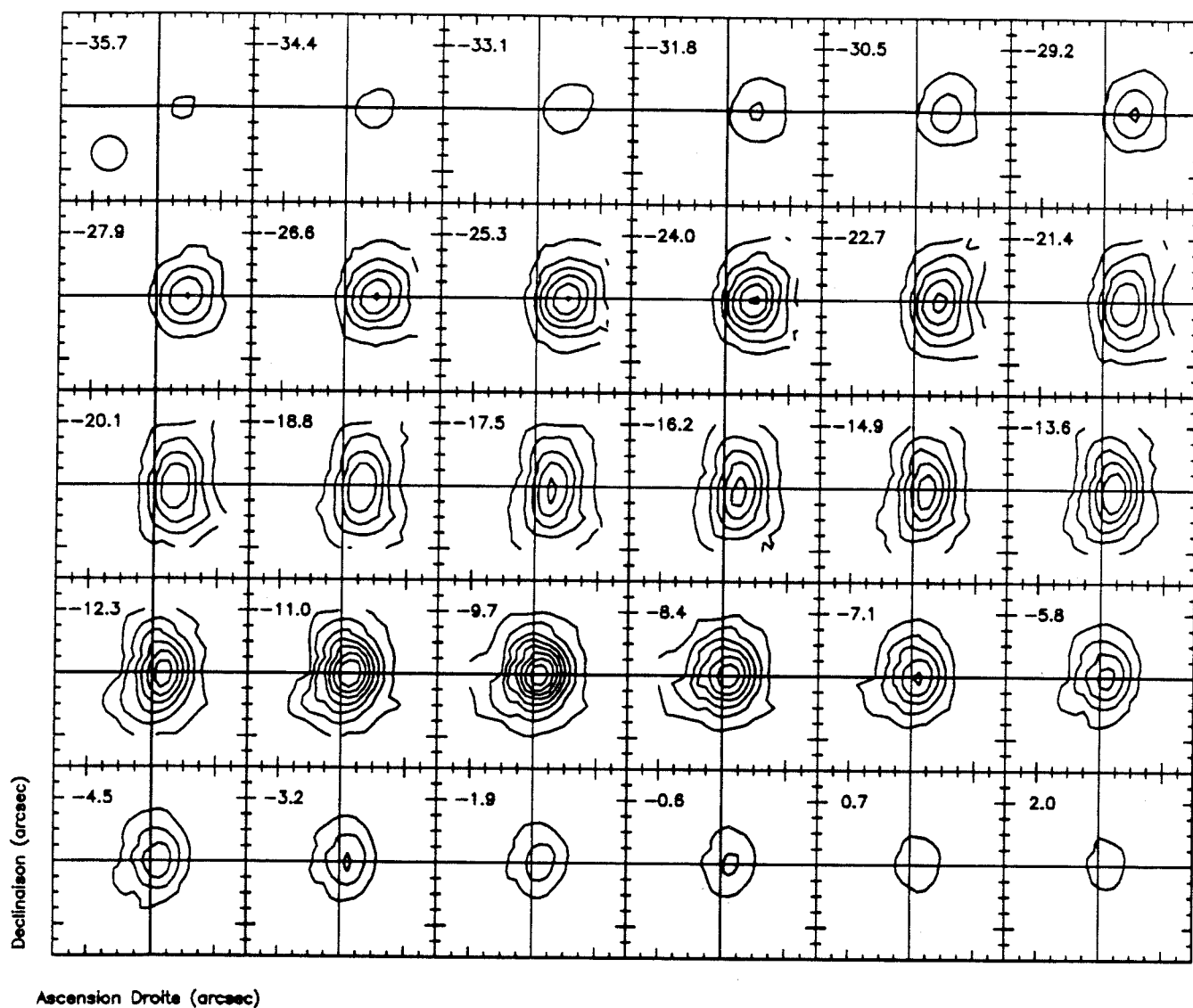


Figure B.4 : Cartes de l'intensité de $^{12}\text{CO}(2-1)$ dans les 30 canaux centraux des spectres. La vitesse centrale de l'enveloppe est -16.8 km/s et la largeur d'un canal est de 1.3 km/s . Le premier contour correspond à une intensité de 1.0 K et l'intervalle entre deux contours est 1.0 K . Le cercle en bas et à gauche de la première carte figure le lobe à mi-puissance de l'antenne. Les coordonnées du point $(0,0)$ sont les mêmes que dans la Figure B.3.

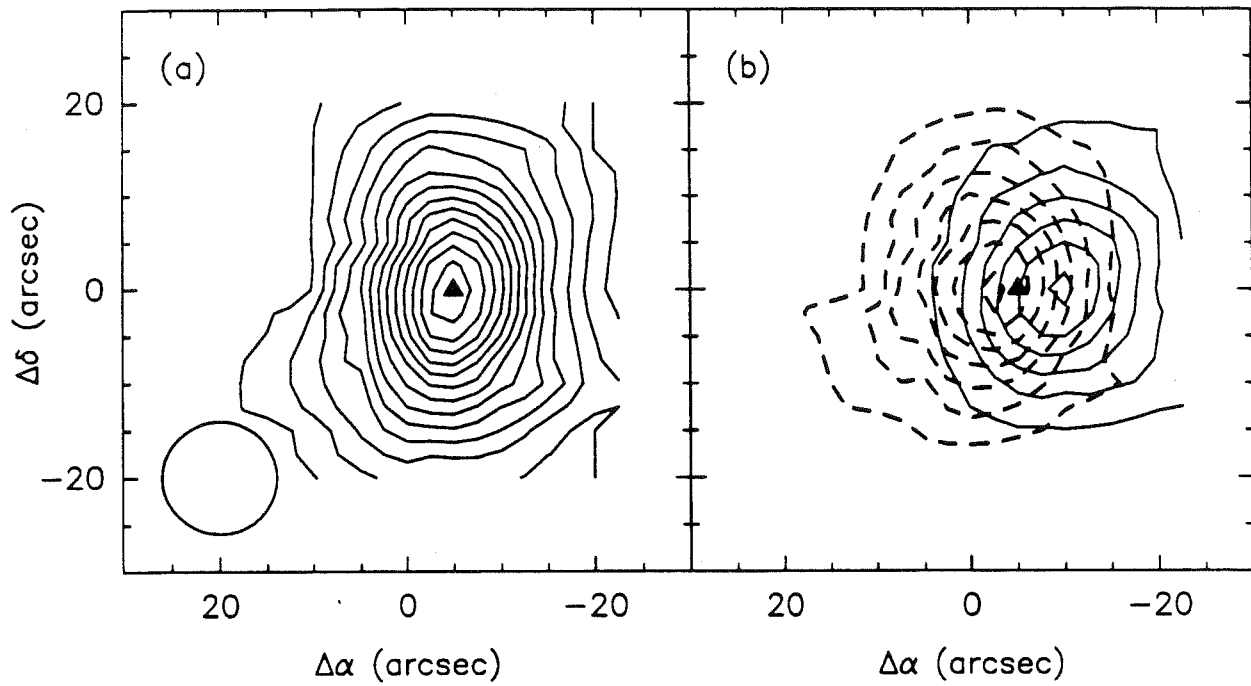


Figure B.5 : Carte d'émission intégrée de $^{12}\text{CO}(2-1)$, en (a) dans la composante centrale ($-25.3 \text{ km/s} < \text{VLSR} < -8.4 \text{ km/s}$), en (b) dans les ailes rouge ($-8.4 \text{ km/s} \leq \text{VLSR}$) en pointillés et bleue ($-25.3 \text{ km/s} \geq \text{VLSR}$) en traits pleins. Pour chaque carte, le contour minimum correspond à 6.5 K.km/s et le pas entre deux contours est également 6.5 K.km/s . Le maximum d'intensité de la composante centrale est figuré par un triangle noir et le cercle en bas et à gauche de la carte (a) représente le lobe de l'antenne à mi-puissance. Les coordonnées du point (0,0) sont les mêmes que dans les cartes B.3 et B.4.

Références Bibliographiques

- Audouze, J., Truran, J.W., Zimmerman, B.A. 1973, *Astrophys. J.*, 184, 493.
- Baars, J.W.M., Hooghoudt, B.G., Mezger, P.G., de Jonge, M.J. 1987, *Astron. Astrophys.*, 175, 319.
- Bachiller, R., Gomez-Gonzalez, J., Bujarrabal, V., Martin-Pintado, J. 1988, *Astron. Astrophys.*, 196, L5.
- Baud, B. 1981, *Astrophys. J.*, 250, L79.
- Baud, B. et Habing, H.J. 1983, *Astron. Astrophys.* 127, 173.
- Becker, S.A. et Iben, I. 1980, *Astrophys. J.*, 237, 111.
- Bertschinger, E., Chevalier, R.A. 1985, *Astrophys. J.*, 299, 167.
- Biegging, J.H., Nguyen-Q-Rieu 1988, *Astrophys. J.*, 329, L107.
- Blake, G.A., Sutton, E.C., Masson, C.R., Phillips, T.G. 1986, *Astrophys. J. Suppl.* 60, 357.
- Bowers, P.F. 1985, dans "Mass Loss from Red Giants", ed. M. Morris et B. Zuckerman (Reidel, Dordrecht).
- Bowers, P.F., Johnston, K.J., Spencer, J.H. 1983, *Astrophys. J.*, 274, 733.
- Bowers, P.F., Hagen, W. 1984, *Astrophys. J.*, 285, 637.
- Brazier, C.R., Brown, J.M. 1984, *Can. J. of Phys.*, 62, 1563.
- Broten, N.W., Oka, T., Avery, L.W., MacLeod, J.M., Kroto, H.W. 1978, *Astrophys. J.*, 223, L105.
- Buhl, D., Snyder, L.E., Lovas, F.J., Johnson, D.R. 1974, *Astrophys. J.*, 192, L97.
- Bujarrabal, V., Nguyen-Q-Rieu 1981, *Astron. Astrophys.*, 102, 65.
- Bujarrabal, V., Cernicharo, J., Guélin, M. 1983, *Astron. Astrophys.*, 128, 355.
- Bujarrabal, V., Planesas, P., Gomez-Gonzalez, J., Martin-Pintado, J., del Romero, A. 1986, *Astron. Astrophys.*, 162, 157.
- Bujarrabal, V., Planesas, P., del Romero, A. 1987, *Astron. Astrophys.*, 175, 164.
- Bujarrabal, V., Gomez-Gonzalez, J., Bachiller, R., Martin-Pintado, J. 1988, *Astron. Astrophys.*, 204, 242.
- Cernicharo, J. 1988, Thèse d'Etat, Université de Paris VII.
- Cernicharo, J., Kahane, C., Gomez-Gonzalez, J., Guélin, M. 1986a, *Astron. Astrophys.*, 164, L1.
- Cernicharo, J., Kahane, C., Gomez-Gonzalez, J., Guélin, M. 1986b, *Astron. Astrophys.*, 167, L5.
- Cernicharo, J., Kahane, C., Gomez-Gonzalez, J., Guélin, M. 1986c, *Astron. Astrophys.*, 167, L9.
- Cernicharo, J., Guélin, M. 1987, *Astron. Astrophys.* 183, L10.
- Cernicharo, J., Guélin, M., Menten, K.M., Walmsley, C.M. 1987a, *Astron. Astrophys.*, 181, L1.

- Cernicharo, J., Guélin, M., Hein, H., Kahane, C. 1987b, *Astron. Astrophys.* 181, L9.
- Cernicharo, J., Kahane, C., Guélin, M., Gomez-Gonzalez, J. 1988, *Astron. Astrophys.*, 189, L1.
- Chan, S.J. et Kwok, S. 1988, *Astrophys. J.*, 334, 362.
- Claussen, M.J., Kleinman, S.G., Joyce, R.R. and Jura M. 1987, *Astrophys. J. Suppl.*, 65, 385.
- Cox, P., Lucas, R., Omont, A., Gusten, R., Guilloteau, S. 1989, en préparation.
- Cummins, S.E., Linke, R.A., Thaddeus, P. 1986, *Astrophys. J. Suppl.* 60, 819.
- DeFrees, D.J., McLean, A.D., Herbst, E. 1985, *Astrophys. J.*, 293, 236.
- Degioia-Eastwood, K., Hackwell, J.A., Grasdalen, G.L., Gehr, R.D. 1981, *Astrophys. J.*, 245, L75.
- Drinkwater, M.J., Wood, P.R. 1985, dans "Mass Loss from Red Giants", ed. M. Morris et B. Zuckerman (Reidel, Dordrecht).
- Elitzur, M. 1980, *Astrophys. J.*, 240, 553.
- Engels, D. 1979, *Astron. Astrophys. Suppl.*, 36, 337.
- Geballe, T.R., Lacy, J.H., Beck, S.C. 1979, *Astrophys. J.*, 230, L47.
- Gehr, R.D., Woolf, N. 1971, *Astrophys. J.*, 165, 285.
- Guélin, M., Cernicharo, J., Kahane, C., Gomez-Gonzalez, J. 1986, *Astron. Astrophys.*, 157, L17.
- Guélin, M., Cernicharo, J., Kahane, C., Gomez-Gonzalez, J., Walmsley, C.M. 1987, *Astron. Astrophys.*, 175, L5.
- Gilman, R.C. 1972, *Astrophys. J.*, 178, 423.
- Glassgold, P.J., Lucas, R., Omont, A. 1986, *Astron. Astrophys.*, 157, 35.
- Glassgold, P.J., Omont, A., Mamon, A.E., Lucas, R. 1987, *Astron. Astrophys.*, 180, 183.
- Goldberg, L. 1986, dans "M, S et C Stars", ed. H.R. Johnson et F. Querci (NSF - CNRS).
- Gomez-Gonzalez, J., Guélin, M., Cernicharo, J., Kahane, C., Bogey, M. 1986, *Astron. Astrophys.*, 168, L11.
- Gordy, W., Cook, R.L. 1970, *Microwave Molecular Spectra*, ed. W. West (Interscience Publishers, New York).
- Gottlieb, C.A., Vrtilik, J.M., Gottlieb, E.W., Thaddeus, P., Hjalmarson, A. 1985, *Astrophys. J.*, 294, L55.
- Gottlieb, C.A., Gottlieb, E.W., Thaddeus, P. 1986, *Astron. Astrophys.*, 164, L5.
- Green, S. 1980, *Astrophys. J.*, 240, 962
- Guélin, M., Green, S., Thaddeus, P. 1978, *Astrophys. J.*, 224, L27.
- Guélin, M., Cernicharo, J., Kahane, C., Gomez-Gonzalez, J., Walmsley, C.M. 1987, *Astron. Astrophys.*, 175, L5.
- Guilloteau, S., Lucas, R., Nguyen-Q-Rieu, Omont, A. 1986, *Astron. Astrophys.*, 165, L1.

Références Bibliographiques

- Guilloteau, S., Omont, A., Lucas, R. 1987, *Astron. Astrophys.*, 176, L24.
- Harris, M.J., Fowler, W.A., Caughlan, G.R., Zimmerman, B.A. 1983, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, 21, 165.
- Harris, M.J., Lambert, D.L. 1984, *Astrophys. J.*, 285, 674.
- Harris, M.J., Lambert, D.L., Smith, V.V. 1985, *Astrophys. J.*, 299, 375.
- Harris, M.J., Lambert, D.L., Hinkle, K.H., Gustafsson, B., Eriksson, K. 1987, *Astrophys. J.*, 316, 294.
- Harris, M.J., Lambert, D.L., Smith, V.V. 1988, *Astrophys. J.*, 325, 768.
- Hartmann, L., MacGregor, K.B. 1980, *Astrophys. J.*, 242, 260.
- Hartmann, L., Averett, E.H. 1984
- Hawkins, I., Jura, M. 1987, *Astrophys. J.*, 317, 926.
- Herman, J. et Habing, H.J. 1985, *Phys. Reports*, 124, 256.
- Heske, A., Forveille, T., Omont, A., Van de Veen, W.E.C.J., Habing, H.J. 1989, en préparation.
- Holzer, T.E., MacGregor, K.B. 1985, dans "Mass Loss from Red Giants", ed. M. Morris et B. Zuckerman (Reidel, Dordrecht).
- Iben I. 1986, *Quat. J. Roy. Astr. Soc.*, 26, 1.
- Iben I. et Renzini A. 1983, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, 21, 271.
- Irvine, W.M., Schloerb, F.P. 1984, *Astrophys. J.*, 282, 516.
- Izumiura H., Ukita, N., Kawabe, R., Kaifu, N., Tsuji, T., Unno, W., Koyama, K. 1987, *Astrophys. J.*, 323, L81.
- Johansson, L.E.B., Andersson, C., Ellder, J., Friberg P., Hjalmarson, A., Höglund, B., Irvine, W.M., Olofsson, H., Rydbeck, G. 1985, *Astron. Astrophys.*, 130, 227 et *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.*, 60, 135.
- Johnson, H.R., Querci, F.R. 1986, "Les étoiles M" Monographie éditée par le CNRS et la NASA.
- Jones, T.W., Ney, E.P., Stein, W.A. 1981, *Astrophys. J.*, 250, 324.
- Jura, M. 1984, *Astrophys. J.*, 282, 200.
- Jura, M. 1986, *Astrophys. J.*, 303, 327.
- Jura, M. 1987, *Astrophys. J.*, 313, 743.
- Jura, M. 1988, *Astrophys. J. Suppl.*, 66, 31.
- Jura M. et Kleinman S.G. 1989, *Astrophys. J.*, 341, 359.
- Kahane, C., Gomez-Gonzalez, J., Cernicharo, J., Guélin, M. 1988a, *Astron. Astrophys.*, 190, 167.
- Kahane, C., Maizels, C., Jura, M. 1988b, *Astrophys. J.*, 328, L25.
- Kaifu, N., Suzuki, H., Ohishi, M., Miyaji, T., Hishikawa, S., Kasuga, T., Morimoto, M. 1987, *Astrophys. J.*, 317, L111.

- Keady, J.J., Ridgway, S.T. 1984, communication privée à A. Omont.
- Keady, J.J., Hall, D.N.B., Ridgway, S.T. 1988, *Astrophys. J.*, 326, 832.
- King, G.M., Hainer, R.M., Cross, P.C. 1943, *J. Chem. Phys.*, 11, 27.
- Kleinman, S.G., Jura, M., Joyce, R.R. 1989, en préparation
- Knapp, G.R. 1985, *Astrophys. J.*, 293, 273.
- Knapp, G.R., Phillips, T.G., Leighton, R.B., Lo, K.Y., Wannier, P.G., Wootten, H.A., Huggins, P.J. 1982, *Astrophys. J.*, 252, 616.
- Knapp, G.R., Morris, M. 1985, *Astrophys. J.*, 292, 640.
- Kroto, H.W., Kirby, C., Walton, D.R.M., Avarly, L.W., Broten, N.W., MacLeod, J.M., Oka, T. 1978, *Astrophys. J.*, 219, L133.
- Kuiper, T.B.H., Knapp, G.R., Knapp, S.L., Brown, R.L. 1976, *Astrophys. J.*, 204, 408.
- Kutner, M.L., Machnik, D.E., Tucker, K.D., Massano, W. 1980, *Astrophys. J.*, 254, 538.
- Kwan, J., Hill, F. 1977, *Astrophys. J.*, 215, 781.
- Kwan, J., Linke, R.L. 1982, *Astrophys. J.*, 254, 587.
- Kwok, S. 1975, *Astrophys. J.* 198, 583.
- Kwok, S. 1987, dans "Late Stages of Stellar Evolution", ed. S. Kwok et S.R. Pottasch, (Reidel, Dordrecht 1987).
- Lambert, D.L., Gustafsson, B., Eriksson, K., Hinkle, K.H. 1986, *Astrophys. J. Suppl.*, 62, 373.
- Langer, W.D., Graedel, T.E., Frerking, M.A., Armentrout, P.B. 1984, *Astrophys. J.*, 277, 581.
- Likkell, L., Omont, A., Forveille, T., Morris, M. 1987, *Astron. Astrophys.*, 173, L11.
- Likkell, L., Forveille, T., Omont, A., Morris, M. 1988, *Astron. Astrophys.*, 198, L1.
- Loup, C., Forveille, T., Omont, A., Jura, M. 1989, en préparation.
- Lucas, R., 1987, communication privée.
- Lucas, R., Omont, A., Guilloteau, S., Nguyen-Q-Rieu 1985, *Astron. Astrophys.*, 154, L12.
- Lucas, R., Guilloteau, S., Omont, A. 1988, *Astron. Astrophys.*, 194, 230.
- Lucy, L.B. 1976, *Astrophys. J.*, 205, 482.
- Maciel, W.J. 1976, *Astron. Astrophys.*, 48, 27.
- Maciel, W.J. 1977, *Astron. Astrophys.*, 57, 273.
- Mamon, A.E., Glassgold, P.J., Omont, A. 1987, *Astrophys. J.*, 323, 306.
- Mamon, A.E., Glassgold, P.J., Huggins, P.J. 1988, *Astrophys. J.*, 328, 797.

Références Bibliographiques

- Martin, P.G., Rogers, C. 1987, *Astrophys. J.*, 322, 374.
- Matthews, H.E. et Irvine, W.M. 1985, *Astrophys. J.*, 298, L61.
- Menietti, J.D., Fix, J.D. 1978, *Astrophys. J.*, 224, 961.
- Michalopoulos, D.L., Geusic, M.E., Langridge-Smith, P.R.R., Smalley, R.E. 1984, *J. Chem. Phys.*, 80, 3556.
- Miller, S.L., Townes, C.H. 1953, *Phys. Rev.*, 90, 537.
- Morris, M. 1975, *Astrophys. J.*, 197, 603.
- Morris, M. 1980, *Astrophys. J.*, 236, 823.
- Morris, M., Zuckerman, B., Palmer, P., Turner, B.E. 1971, *Astrophys. J.*, 170, L109.
- Morris, M. 1985, dans "Mass Loss from Red Giants", ed. M. Morris et B. Zuckerman (Reidel, Dordrecht).
- Morris, M. 1987, *Pub. Astron. Soc. Pac.*, 99, 1115.
- Morris, M., Lucas, R., Omont, A. 1985, *Astron. Astrophys.*, 142, 107.
- Nejad, L.A.M., Millar, T.J. 1988, *Mon. Not. Roy. Astr. Soc.*, 230, 79.
- Nercessian, E., Guilloteau, S., Omont, A. et Benayoun, J.J. 1988, *Astron. Astrophys.*
- Neugebauer, G., Leighton, R.B. 1969, NASA SP 3047.
- Nguyen-Q-Rieu 1986, dans "M, S et C Stars", ed. H.R. Johnson et F. Querci (NSF - CNRS).
- Nguyen-Q-Rieu, Bujarrabal, V., Olofsson, H., Johansson, L.E.B., Turner, B.E. 1984, *Astrophys. J.*, 286, 276.
- Nguyen-Q-Rieu, Epchtein, N., Truong-Bach, Cohen, M. 1987, *Astron. Astrophys.*, 180, 117.
- Olofsson, H. 1985, dans "Workshop on Submillimeter Astronomy", ed. P.A. Shaver et K. Kjar (Garching : ESO)
- Olofsson, H., Johansson, L.E.B., Hjalmarsen, A., Nguyen-Q-Rieu 1982, *Astron. Astrophys.*, 107, 128.
- Olofsson, H., Eriksson, K., Gustafsson, B. 1987, *Astron. Astrophys.*, 183, L13.
- Olofsson, H., Eriksson, K., Gustafsson, B. 1988, *Astron. Astrophys.*, 196, L1.
- Omont, A. 1985, dans "Mass Loss from Red Giants", ed. M. Morris et B. Zuckerman (Reidel, Dordrecht).
- Omont, A. 1989, dans "Modelling of the stellar environment : How and Why ?", ed. P. Delache, S. Laloe, C. Magnan (Publications "Frontières", Gif-sur-Yvette).
- Omont, A., Lucas, R., Guilloteau, S., Morris, M. 1988, *Astron. Astrophys.*
- Pearson, J.C., Gottlieb, C.A., Woodward, D.R., Thaddeus, P. 1988, *Astron. Astrophys.*, 189, L13.
- Penzias, A.A., 1980, dans *Interstellar Molecules* (p.397), Symposium IAU no 87, ed. B.H. Andrew, Reidel, Dordrecht.
- Penzias, A.A. 1981a, *Astrophys. J.*, 249, 513.

- Penzias, A.A. 1981b, *Astrophys. J.*, 249, 518.
- Price, S.D., Walker, R.G. 1976, AFGL TR 76-0208.
- Price, S.D., Murdock, T.L. 1983, AFGL TR 83-0161.
- Querci, F. 1986, dans "M, S et C Stars", ed. H.R. Johnson et F. Querci (NSF - CNRS).
- Reid, M.J. et Moran, J.M. 1981, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, 19, 231.
- Ridgway, S.T. et Keady, J.J. 1988, *Astrophys. J.*, 326, 843.
- Renzini, A. et Voli, M. 1981, *Astron. Astrophys.*, 94, 175.
- Rowan-Robinson, M., Harris, S. 1982, *Mon. Not. Roy. Astr. Soc.*, 200, 197.
- Rowan-Robinson, M., Harris, S. 1983a, *Mon. Not. Roy. Astr. Soc.*, 202, 767.
- Rowan-Robinson, M., Harris, S. 1983b, *Mon. Not. Roy. Astr. Soc.*, 202, 797.
- Sahai, R., 1989, *Astrophys. J.*, sous presse.
- Saito, S., Kawaguchi, K., Yamamoto, S., Ohishi, M., Suzuki, H., Kaifu, N. 1987, *Astrophys. J.*, 317, L115.
- Scalo, J.M. 1976, *Astrophys. J.*, 206, 795.
- Schonberner, D. 1987 dans "The Second Conference on Faint Blue Stars", ed. A.G. Davis Philip, D.S. Hayes et J.W. Liebert (Davis Press Inc., Schenectady, New York)
- Schutte W., Tielens, A.G.G.M., 1989,
- Sivagnanam, P. 1988, Ph. D. Thesis.
- Solomon, P.M., Jefferts, K.B., Penzias, A.A., Wilson, R.W. 1971, *Astrophys. J.*, 168, L107.
- Sopka, R.J., Hildebrand, R., Jaffe, D.T., Gatley, I., Roellig, T., Werner, M., Jura, M., Zuckerman, B. 1985, *Astrophys. J.*, 294, 242.
- Stark, A.A. 1981, *Astrophys. J.*, 249, 99.
- Stephenson, C.B. 1973, *Astrophys. J.*, 186, 589.
- Sutton, E.C., Blake, G.A., Masson, C.R., Phillips, T.G. 1985, *Astrophys. J. Suppl.* 58, 341.
- Suzuki, H., Ohishi, M., Kaifu, N., Ishikawa, S., Kasuga, T., Saito, S., Kawaguchi, K. 1986, *Pub. Astr. Soc. Japan*, 38, 911.
- te Lintel Hekkert, P., Caswell, R., Haynes, R., Norris, R., Le Squeren, A.M., Sivagnanam, P. et Wouterloot, J. 1988, *Astron. Astrophys.*, 202, L19.
- Thaddeus, P., Cumings, S.E., Linke, R.A. 1984, *Astrophys. J.*, 283, L45.
- Thaddeus, P., J.M., Gottlieb, C.A., Hjalmarsen, A., Johanson, L.E.B., Irvine, W.M., Friberg, P., Linke, R.A. 1985a, *Astrophys. J.*, 294, L49.
- Thaddeus, P., Vrtilik, J.M., Gottlieb, C.A. 1985b, *Astrophys. J.*, 299, L63.

Références Bibliographiques

- Thronson H.A., Latter, W.B., Black, J.H., Bally, J. et Hacking, P. 1987, *Astrophys. J.*, 322, 770.
- Tielens, A.G.G.M. 1983, *Astrophys. J.*, 271, 702.
- Toombs, R.I., Becklin, E.E., Frogel, J.A., Law, S.K., Porter, F.C., Westphal, J.A. 1972, *Astrophys. J.*, 173, L171.
- Torres-Peimbert, S. et Wallerstein, G. 1966, *Astrophys. J.*, 146, 724.
- Townes, C.H., Schawlow, A.L.S. 1975, *Microwave Spectroscopy* (Dover Publications INC., New York).
- Tsuji, T., Unno, W., Kaifu, N., Izumiura, H., Ukita, N., Cho, S., Koyama, K. 1987, *Astrophys. J.*, 327, L23.
- Tucker, K.D., Kutner, M.L., Thaddeus, P. 1974, *Astrophys. J.*, 193, L115.
- Wallerstein, G., Dominy, J.F., Suntzeff, N.B., 1985, *Compte-rendus de l'Atelier ESO "Production et Distribution des Eléments C, N, O"*.
- van der Veen, W.E.C.J., Habing, H.J. 1988, *Astron. Astrophys.*, 194, 125.
- Wannier, P.G. 1980, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.*, 18, 399.
- Wannier, P.G. 1985, *Compte-rendus de l'Atelier ESO "Production et Distribution des Eléments C, N, O"*.
- Wannier, P.G., Sahai, R. 1987, *Astrophys. J.*, 319, 367.
- Weidemann, V. 1987 dans "The Second Conference on Faint Blue Stars", ed. A.G. Davis Philip, D.S. Hayes et J.W. Liebert (Davis Press Inc., Schenectady, New York)
- Willems, F.J. et de Jong, T. 1988, *Astron. Astrophys.*, 196, 173.
- Willson, L.A., Hill, S.J. 1979, *Astrophys. J.*, 228, 854.
- Willson, L.A., Bowen, G.H. 1986, *Irish Astron. J.*, 17, 249.
- Wilson, R.W., Solomon, P.M., Penzias, A.A., Jefferts, K.B. 1971, *Astrophys. J.*, 169, L35.
- Wilson, W.J., Schwartz, P.R., Epstein, E.E. 1973, *Astrophys. J.*, 183, 871.
- Woosley, S.E. 1986, dans "Nucleosynthesis and chemical evolution", 16ème cours de la Société Suisse d'Astronomie et d'Astrophysique, ed. B. Hauck, A. Maeder, G. Meynet (Publications de l'Observatoire de Genève).
- Wood, P.R. 1979, *Astrophys. J.*, 227, 220.
- Woodrow, J.E.J., Auman, J.R. 1982, *Astrophys. J.*, 257, 247.
- Yamamoto, S., Saito, S., Kawaguchi, K., Kaifu, N., Suzuki, H., Ohishi, M. 1987, *Astrophys. J.*, 317, L119.
- Zuckerman, B. 1980, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* 18, 263.
- Zuckerman B., Palmer, P., Morris, M., Turner, B.E., Gilra, D.P., Bowers, P.F., Gilmore, W.S. 1977, *Astrophys. J.* 211, L97.
- Zuckerman B., Palmer, P., Gilra, D.F., Turner, B.E., Morris, M. 1978, *Astrophys. J.* 220, L53;

Zuckerman B., Dyck, H.M. 1986a, *Astrophys. J.*, 304, 394.

Zuckerman B., Dyck, H.M. 1986b, *Astrophys. J.*, 311, 345.

Zuckerman B., Dyck, H.M. 1989, *Astron. Astrophys.*, 209, 119.

Zuckerman, B., Dyck, H.M., Claussen, M.J. 1986, *Astrophys. J.*, 304, 401.

Résumé

La première partie de ce travail concerne la recherche de nouvelles molécules interstellaires et circumstellaires. Après une description des divers hamiltoniens utilisés pour le calcul des fréquences des spectres moléculaires dans le domaine des ondes millimétriques, elle expose la recherche et la détection de nouvelles molécules, à l'aide d'observations réalisées avec le radiotélescope de 30m de l'IRAM, ainsi que la couverture spectrale, effectuée à 2mm et 3mm, de l'émission de l'enveloppe circumstellaire IRC+10216.

La deuxième partie de ce travail est consacrée à la détermination de rapports d'abondances isotopiques dans des enveloppes circumstellaires de Géantes Rouges, à partir d'observations millimétriques de raies moléculaires. Les rapports isotopiques du carbone, de l'azote, du soufre et du silicium sont mesurés dans l'enveloppe d'une étoile carbonée, IRC+10216; ceux du carbone, dans quatre enveloppes d'étoiles de type J (Y CVn, RY Dra, T Lyr, et WZ Cas); ceux de l'oxygène, dans deux étoiles carbonées (CIT6 et IRC+10216), deux pre-nébuleuses planétaires (CRL618 et CRL2688) et une nébuleuse planétaire (NGC7027). Les rapports isotopiques ainsi mesurés sont comparés aux valeurs déduites d'observations infrarouge, ainsi qu'aux prédictions des modèles théoriques des processus de nucléosynthèse et de mélange dans les étoiles de type Géantes Rouges.

Mots-clés

RADIOASTRONOMIE

MOLECULES INTERSTELLAIRES

ABONDANCES ISOTOPIQUES

ONDES MILLIMETRIQUES

ENVELOPPES CIRCUMSTELLAIRES

NUCLEOSYNTHESE